



Departamento de Física Aplicada
Facultad de Ciencias
Universidad Autónoma de Madrid

Desarrollo de nuevos paradigmas en sensores nanomecánicos:

Resonadores acoplados y nanohilos de silicio

Tesis para optar al grado de Doctor en Ciencias Físicas presentada por:

Eduardo Gil Santos

Dirigida por el Dr. Francisco Javier Tamayo de Miguel

Tutelada por el Dr. Vicente Torres Costa



Instituto de Microelectrónica de Madrid
(Centro nacional de microelectrónica)

El presente trabajo ha sido realizado en el Instituto de Microelectrónica de Madrid (IMM-CNM), perteneciente al Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC). Ha sido dirigido por el Dr. Francisco Javier Tamayo de Miguel con la tutoría del Dr. Vicente Torres Costa.

La realización de esta Tesis ha sido posible gracias a la concesión de una beca JAE Predoc por parte del CSIC.

Índice

Introducción	- 1 -
1. CONTEXTO HISTORICO Y CIENTIFICO.....	- 2 -
2. MOTIVACIÓN	- 4 -
3. OBJETIVOS	- 5 -
4. ESTRUCTURA	- 6 -
REFERENCIAS	- 8 -

Capítulo 1

Teoría de resonadores nanomecánicos	- 11 -
1.1. INTRODUCCIÓN A LA TEORÍA DE LA ELASTICIDAD	- 12 -
1.1.1. Tensor de deformación y de tensiones en sólidos.....	- 12 -
1.1.2. Termodinámica de las deformaciones	- 14 -
1.1.3. Ley de Hooke.....	- 15 -
1.2. MODELO DE EULER-BERNOULLI	- 17 -
1.2.1. Deflexión en palancas	- 17 -
1.2.2. Ecuación de Euler-Bernoulli.....	- 19 -
1.2.3. Resolución espacial y temporal	- 21 -
1.3. MODELO DEL OSCILADOR ARMÓNICO	- 23 -
1.3.1. Respuesta en frecuencia.....	- 24 -

1.3.2. Relación entre el modelo del oscilador armónico y la ecuación de Euler-Bernoulli	26 -
1.4. EFECTO DE LA ADSORCIÓN DE PARTICULAS SOBRE LA FRECUENCIA DE RESONANCIA	27 -
1.4.1. Método de Rayleigh.....	27 -
1.4.2. Sensibilidad y límite de detección	29 -
1.5. RUIDO TERMOMECAÁNICO Y LÍMITE DE DETECCIÓN	30 -
1.5.1. Teorema Fluctuacion-disipación.....	30 -
1.5.2. Ruido en amplitud y en frecuencia	32 -
1.5.3. Límite termomecánico de detección en masa	32 -
REFERENCIAS	33 -

Capítulo 2

Sistema experimental..... - 35 -

2.1. TRANSDUCCIÓN Y EXCITACIÓN DE SISTEMAS NANOMECAÁNICOS	36 -
2.1.1. Métodos de transducción ópticos.....	36 -
2.1.2. Métodos de transducción eléctricos.....	38 -
2.1.3. Métodos de excitación	39 -
2.2. SISTEMA EXPERIMENTAL	40 -
2.3. DEPOSICIÓN DE CARBONO POR HAZ DE ELECTRONES	43 -
REFERENCIAS	45 -

Capítulo 3

Desarrollo de sensores nanomecánicos acoplados - 47 -

3.1. INTRODUCCIÓN	- 48 -
3.2. RESONADORES ACOPLADOS MECÁNICAMENTE	- 49 -
3.2.1. Fabricación.....	- 49 -
3.2.2. Caracterización óptica.....	- 51 -
3.3. TEORIA DE RESONADORES ACOPLADOS.....	- 52 -
3.3.1. Localización de los modos de vibración.....	- 55 -
3.3.2. Ventajas de los resonadores acoplados como sensores	- 58 -
3.4. ESTUDIO DEL ACOPLAMIENTO MECÁNICO	- 59 -
3.4.1. Resultados experimentales.....	- 59 -
3.4.2. Simulaciones por elementos finitos	- 60 -
3.5. LOCALIZACIÓN DE LOS MODOS: AUMENTO DE LA SENSIBILIDAD	- 62 -
REFERENCIAS	- 64 -

Capítulo 4

Detección de masa basada en la respuesta ante fuerzas externas y el ruido termomecánico de resonadores acoplados.. - 67 -

4.1. RESPUESTA DE LOS RESONADORES ACOPLADOS	- 68 -
4.1.1. Ruido termomecánico	- 70 -
4.1.2. Fuerzas externas.....	- 71 -
4.2. DETECCIÓN DE MASA	- 73 -
4.3. LÍMITE DE DETECCIÓN EN MASA	- 76 -
4.4. CONCLUSIONES	- 79 -
4.5. TRABAJO FUTURO.....	- 80 -
4.5.1. Detección de Proteínas y ADN.....	- 80 -
4.5.2. Resonadores acoplados con microcanales	- 80 -
4.5.3. Estudio de múltiples resonadores acoplados	- 81 -
REFERENCIAS	- 82 -

Capítulo 5

Espectroscopía de masa y rigidez basada en nanoresonadores unidimensionales - 83 -

5.1. INTRODUCCION A LOS NANORESONADORES UNIDIMENSIONALES	- 84 -
5.2. NANOHILOS DE SILICIO	- 87 -
5.2.1. Fabricación.....	- 87 -
5.2.2. Caracterización óptica.....	- 88 -
5.3. FORMALISMO DE RITZ.....	- 91 -
5.4. DETECCION Y CARACTERIZACIÓN DE CARBONO	- 96 -
5.4.1. Ruptura de la degeneración de los modos de vibración.....	- 96 -
5.4.2. Rotación de los planos de vibración	- 97 -
5.4.3. Efectos de masa y de rigidez.....	- 99 -
5.5. CONCLUSIONES	- 100 -
REFERENCIAS.....	- 101 -

Capítulo 6

Acoplamiento optomecánico en nanohilos de silicio: Amplificación y enfriamiento..... - 103 -

6.1. INTRODUCCIÓN AL ACOPLAMIENTO OPTOMECÁNICO	- 104 -
6.2. NANOHILOS DE SILICIO METALIZADOS CON ORO	- 106 -
6.2.1. Metalización.....	- 106 -
6.2.2. Caracterización de las dimensiones del dispositivo.....	- 107 -
6.2.3. Caracterización óptica: Amplificación y enfriamiento.....	- 108 -
6.3. TEORÍA DEL ACOPLAMIENTO OPTOMECÁNICO.....	- 109 -
6.4. FUERZA FOTOTÉRMICA	- 112 -

6.4.1. Modos de Mie	- 112 -
6.4.2. Interacción de los modos de Mie con la onda estacionaria.....	- 114 -
6.4.3. Distribución de temperatura y fuerza fototérmica	- 116 -
6.5. AMPLIFICACIÓN Y ENFRIAMIENTO	- 120 -
6.5.1. Estudio en función de la potencia del haz.....	- 120 -
6.5.1. Estabilidad en frecuencia	- 122 -
6.5.2. Amplificación con luz no coherente	- 124 -
6.6. CONCLUSIONES	- 125 -
6.7. TRABAJO FUTURO.....	- 126 -
6.7.1. Espectrómetro biológico	- 126 -
6.7.2. Nanohilos Acoplados	- 126 -
6.7.3. Amplificación Paramétrica	- 127 -
REFERENCIAS	- 128 -

Apéndice

Dependencia de la constante de acoplamiento mecánico con las dimensiones y propiedades de los resonadores	- 131 -
--	----------------

Lista de Publicaciones.....	- 135 -
------------------------------------	----------------

Introducción

1. CONTEXTO HISTORICO Y CIENTIFICO

El trabajo de investigación que ha dado lugar al desarrollo de esta tesis se encuentra enmarcado dentro del campo de la nanotecnología. La nanotecnología trata el estudio, diseño, creación, síntesis, manipulación y aplicación de materiales, aparatos y sistemas funcionales a través del control de la materia a la nanoescala. La explotación de los nuevos fenómenos y propiedades físicas (ópticas, eléctricas, térmicas, mecánicas, etc) que presenta la materia a la nanoescala permitirá la fabricación de nuevos dispositivos, que proporcionarán nuevas aplicaciones en todos los campos de la ciencia.

Además de en los campos relacionados con su origen, como la física, la química, la ingeniería o la robótica, el impacto de la nanotecnología será crucial en campos como la biología, la medicina o el medio ambiente. Dado que las dimensiones de las biomoléculas y los sistemas biológicos, son comparables o incluso mayores que las de los nanodispositivos, es de esperar que la nanotecnología tenga un fuerte impacto en biomedicina. Por ejemplo, las moléculas de ADN o los virus poseen dimensiones en el rango de las decenas de nanómetros y las células o bacterias en el de las micras[1]. En particular, los recientes avances en la identificación de nuevas proteínas o marcadores químicos asociados con enfermedades, ha despertado un gran interés en su detección para el diagnóstico precoz de estas enfermedades[2].

En la actualidad, la mayoría de las técnicas utilizadas para la detección de biomoléculas usan marcadores químicos, como material radioactivo, puntos cuánticos o marcadores fluorescentes, en los receptores [3]. Cuando tiene lugar el enlace entre el receptor y la biomolécula los marcadores emiten luz. Pese a que la interacción entre el receptor y la biomolécula es muy específica, las interacciones con otras biomoléculas pueden dar lugar a adsorciones no específicas, que también den lugar a la emisión de luz, lo que limitará su sensibilidad. Además de las limitaciones de estas técnicas a la hora de detectar biomoléculas de manera individual, la utilización de marcadores exige un costo adicional de tiempo y dinero. Por este motivo, en los últimos años se están desarrollando una amplia variedad de sensores biológicos libre de marcadores[4] como son los sensores de resonancia de plasmón superficial (SPR)[5], las microbalanzas de cuarzo (QMB)[6], los transistores de efecto campo basados en nanotubos de carbono [7] o los sistemas micromecánicos[2]. Entre estas técnicas, los sistemas micromecánicos destacan por su fácil fabricación, alta sensibilidad y por la posibilidad de implementar dispositivos micrométricos capaces de analizar múltiples biomoléculas en paralelo con un mínimo consumo de muestra. Además de por sus capacidades como sensores biológicos, químicos o medioambientales[8], los sistemas micromecánicos han despertado un gran interés en otros campos de la ciencia, como en electrónica por su aplicación para el procesamiento de señales de radiofrecuencia[9] o incluso en física cuántica, ya que estos dispositivos pueden llegar a permitir el estudio de fenómenos cuánticos en objetos mesoscópico[10].

El interés en el estudio de los sistemas micromecánicos surge a partir de la invención del microscopio de fuerzas atómicas (AFM) en 1986[11]. El AFM consiste en una micropalanca con una punta muy afilada en el extremo libre que se hace pasar por encima de una superficie, la interacción entre la punta y la muestra ejerce una fuerza sobre la micropalanca que produce su deflexión. De forma simplificada, la medida de la deflexión de la micropalanca proporciona información acerca de la composición y la topografía de la muestra. Su capacidad para obtener imágenes de superficies con resolución atómica y su gran versatilidad, extendió el uso de este tipo de microscopios y poco a poco comenzaron a surgir nuevas aplicaciones para las micropalancas.

En 1994 se plantea por primera vez la aplicación de las micropalancas como sensores[12]. En este trabajo utilizan una micropalancas compuestas de distintos materiales por lo que los cambios de temperatura inducidos en el medio que la rodean provocan su deflexión. Además, con estos dispositivos también son capaces de detectar la presencia de mercurio en fase gas. A partir de este trabajo surgen numerosos estudios sobre el uso de las micropalancas como sensores químicos y detectores de explosivos. Ya en el año 2000, las micropalancas se aplican por primera vez como sensores biológicos y en concreto, a la detección de ADN[13]. Hasta la fecha los sensores mecánicos han sido empleados en la detección de todo tipo de sistemas biológicos y biomoléculas como células, bacterias, virus, proteínas o ADN. Como ejemplos de la capacidad de estos sensores, en el caso de las bacterias, no solo se ha logrado su detección sino que también se ha llegado a observar su metabolismo[14] y en cuanto a la detección de proteínas, trabajos recientes han demostrado que la detección e identificación a nivel individual podrá lograrse en los próximos años[15].

Al igual que en el caso del microscopio de fuerzas atómicas, los sensores mecánicos poseen dos modos de operación: el modo estático y el modo dinámico[16]. El modo estático basa su funcionamiento en la medida de la deflexión de la micropalanca provocada por algún tipo de fuerza. En el caso del AFM, la fuerza proviene de la interacción punta-muestra, mientras que en los sensores mecánicos la fuerza es debida a la diferencia de tensión superficial entre ambas caras de la micropalanca. Normalmente, las micropalancas que operan en el modo estático tienen que estar formadas por distintos materiales, de manera que una sola de las caras actúe como superficie sensora.

En el modo dinámico el principio de operación se basa en la modificación de la frecuencia de resonancia debido a la variación de alguna de las propiedades de la micropalanca. En el caso del AFM se debe a que la constante elástica de la micropalanca se altera por verse sometida a un gradiente de fuerzas. En su aplicación como sensores biológicos, normalmente se debe al aumento de la masa de la micropalanca. El cambio en frecuencia será proporcional a la masa de la biomolécula detectada e inversamente proporcional a la masa del resonador, por lo que la reducción de la masa del resonador aumenta la sensibilidad. La principal ventaja del modo dinámico frente al modo estático es su sensibilidad, ya que esta puede alcanzar niveles sin precedentes mediante la reducción del tamaño de los

dispositivos y por tanto de su masa. Pero además del tamaño, habrá otros parámetros que determinen la sensibilidad de estos dispositivos entre los que destaca su factor de calidad. Como veremos a lo largo del trabajo, en aire y sobretodo en líquidos, la disipación de energía de los resonadores aumenta drásticamente, lo que disminuye su factor de calidad y por tanto su sensibilidad. Como consecuencia la aplicación de estos dispositivos en medios líquidos se ve muy limitada y es en estos casos donde el modo estático puede ser de mayor utilidad. Pese a ello, se han estudiado diferentes maneras de solventar estas dificultades y conseguir mejorar la sensibilidad del modo dinámico en medios líquidos. Entre ellas cabe destacar los diferentes métodos de autoexcitación[17, 18] y el uso de resonadores con microcanales[19, 20]. Por ser uno de los métodos de detección en masa más sensible, este trabajo se ha centrado en el estudio de los resonadores nanomecánicos y en concreto, en el desarrollo de nuevos métodos de detección que mejoren la sensibilidad de estos dispositivos y permitan su aplicación en medios.

Los recientes avances en las técnicas de nanofabricación están haciendo posible la reducción del tamaño de los sistemas micromecánicos con un alto grado de reproducibilidad. El reducido tamaño de esta nueva generación de sistemas nanomecánicos (NMS) conlleva una gran variedad de propiedades atractivas, tales como frecuencias de resonancia en el rango de las microondas y masas activas del orden del femtogramo, permitiendo medidas de masa con resolución de subatómica [21]. Las aplicaciones potenciales de tales propiedades incluyen sensores ultrarápidos de todo tipo, biológicos, químicos, físicos, etc[22]. En concreto, los NMS han abierto una nueva puerta para la detección ultrasensible de masa, que posibilitaría la detección biológica al nivel de una sola molécula. Además, el tamaño nanométrico de los dispositivos les conferirá nuevas propiedades y por tanto nuevas aplicaciones como sensores. El desarrollo de este tipo de sensores biológicos ultrasensibles requiere superar una serie de importantes obstáculos, entre los que se encuentran la implementación de tecnologías de actuación y transducción suficientemente sensibles, así como una completa comprensión de la respuesta de estos nanodispositivos ante la adsorción de partículas.

2. MOTIVACIÓN

Este trabajo se centra en el estudio de dos de los tipos de NMS más prometedores en el campo de los sensores: los nanohilos de silicio[23, 24] y los resonadores acoplados[25, 26].

El primero de ellos forma parte de un grupo de NMS, entre los que también se encuentran los nanotubos de carbono o nanohilos de otros materiales, fabricados por técnicas “bottom-up”, cuya principal característica es su baja basa, además de su gran calidad estructural. Los nanohilos de silicio destacan entre estos por su capacidad para ser integrados en microestructuras, permitiendo el control de su

posicionamiento y de sus dimensiones. Además, su gran calidad estructural y su robustez en el anclado proporciona un alto factor de calidad, lo que junto con su baja masa y alta frecuencia permite alcanzar una gran sensibilidad en masa. Además, a diferencia de los sistemas micromecánicos convencionales, fabricados por técnicas “top-down”, la simetría axial que presentan este tipo de dispositivos junto con sus secciones nanométricas, proporcionarán a estos dispositivos nuevas capacidades en su aplicación como sensores.

Los resonadores acoplados destacan por la posibilidad de mejorar las prestaciones de los resonadores individuales y en concreto, su sensibilidad, a través de la medida de la localización de los modos de vibración. Cuando dos resonadores acoplados son idénticos, los modos individuales de oscilación se desdoblan en dos modos colectivos de frecuencias muy cercanas, simétrico y el antisimétrico, en los que ambos resonadores vibran con la misma amplitud, en fase y antifase respectivamente. Si una partícula se adsorbe sobre uno de ellos, estos dejan de ser idénticos y se produce la localización de los modos de oscilación, por lo que uno de los resonadores oscila más en uno de los modos y viceversa. La disminución del acoplamiento de estos sistemas mejora su sensibilidad incluso pudiendo llegar a superar la de los resonadores individuales, lo que permitiría crear dispositivos más sensibles sin la necesidad de una extrema miniaturización, que conlleva mayores dificultades tecnológicas.

3. OBJETIVOS

El objetivo principal de esta tesis es el desarrollo de nuevos paradigmas para la detección en masa basados en el estudio de resonadores acoplados y nanohilos de silicio. El trabajo permitirá mejorar los métodos actuales de detección que utilizan los resonadores nanomecánicos, proporcionando mejoras tanto en su sensibilidad como en su selectividad. Además, permitirá diseñar nuevas plataformas sensoras que posibilitan la detección y distinción insitu de biomoléculas a nivel individual.

Para lograr los objetivos propuestos se montará un sistema de interferometría óptica con una resolución lateral inferior a 1 μm , que nos permita medir la respuesta dinámica de nuestros resonadores en alto vacío y a temperatura ambiente. Se ha elegido este método de transducción por ser uno de los métodos menos invasivo y más sensibles, permitiendo la detección de movimientos del orden de picómetros, lo que hace posible la caracterización de las vibraciones térmicas propias de los resonadores, sin necesidad de utilizar excitaciones externas. A pesar de ello, se implementarán también métodos de actuación como el piezoeléctrico o el fototérmico, para probar su eficiencia. Con el fin de caracterizar la respuesta de nuestros resonadores ante la adsorción de moléculas, se desarrollará un método de deposición de partículas que nos permita controlar su posición con precisión submicrométrica y cuyas masas sean del orden de femtogramos.

4. ESTRUCTURA

El presente trabajo de tesis está dividido en seis capítulos que se pueden dividir en tres bloques claramente diferenciados, cada uno de ellos compuesto por dos capítulos. En el primer bloque se exponen los fundamentos teóricos básicos de los resonadores nanomecánicos y se describen los sistemas experimentales utilizados. El siguiente bloque trata el estudio de los resonadores acoplados y el último de los nanohilos de silicio. Además contiene un apéndice que profundiza sobre el estudio de la dependencia de la constante de acoplamiento mecánico en resonadores acoplados. A continuación se resume brevemente el contenido de los capítulos:

En el Capítulo 1 se exponen los fundamentos teóricos básicos de los resonadores nanomecánicos y de su aplicación como sensores de masa. En la primera parte del capítulo, se hace una breve introducción a la teoría de la elasticidad lineal que sirve para introducir el modelo de Euler-Bernouilli. Esta parte, pese a no ser completamente necesaria para comprender el resto del desarrollo teórico presentado en este trabajo, ayuda a comprender los límites del modelo. La segunda parte enmarca toda la teoría que se va a utilizar en desarrollos posteriores, basada en los modelos de Euler-Bernouilli y del resonador de masa puntual. A partir de ellos, se estudia el efecto de la adsorción de partículas sobre la frecuencia de resonancia de los osciladores; y se define la sensibilidad y el límite de detección en masa de nuestros sensores. Además, se explica en detalle el concepto de ruido termomecánico a través del teorema de fluctuación-disipación.

En el Capítulo 2 se presentan los sistemas experimentales utilizados en este trabajo: un sistema interferométrico, para la detección de la vibración de los resonadores; y un sistema de deposición de carbono por haz de electrones, para caracterizar la respuesta de los resonadores ante la adsorción de partículas. Tras comentar las ventajas y desventajas de las distintas técnicas que se utilizan para la caracterización de los resonadores nanomecánicos, se describe el sistema de caracterización óptica que permite detectar las fluctuaciones debidas al ruido termomecánico. Por último, se describe la técnica de deposición de carbono por haz de electrones, que permite controlar de forma muy sencilla tanto la región donde se deposita, con precisión de decenas de nanómetros, como la cantidad de masa depositada, siendo esta del orden de femtogramos por minuto.

El Capítulo 3 sirve de introducción al estudio de los resonadores acoplados. Además, durante este capítulo se demuestra experimentalmente su principio de operación, la localización de los modos de oscilación; y la principal ventaja que presenta este método de detección, el aumento de la sensibilidad conforme el acoplamiento disminuye. Tras hacer una breve introducción a los resonadores acoplados, los modos colectivos de vibración y mostrar una teoría sencilla, veremos en detalle los efectos que produce una absorción diferencial en masa sobre estos sistemas, la localización de los modos. Posteriormente, se explican las ventajas que presentan estos dispositivos frente a los resonadores individuales, entre las que destaca el aumento de la sensibilidad en medidas de

localización al disminuir el acoplamiento. Para demostrar este efecto, analizamos la dependencia de la constante de acoplamiento mecánico con las dimensiones de la membrana que une las palancas y utilizamos la técnica de deposición de carbono por haz de electrones.

En el Capítulo 4 se estudia la respuesta dinámica de los resonadores acoplados cuando son excitados por una fuerza externa o fluctúan debido a las fuerzas térmicas; analizando sus capacidades como sensores de masa. Se verá que ambas respuestas proporcionan información diferente y complementaria, sobre la masa añadida y su localización. La respuesta termomecánica proporciona información más precisa acerca de la localización de la masa, mientras que la respuesta forzada posee un mayor rango dinámico lo que permite conservar la sensibilidad conforme se produce la localización. Además, durante este capítulo, se analiza en detalle tanto el límite termomecánico como el límite experimental en detección de masa que posee la medida de la localización de los modos, y se compara con el de una palanca aislada. Por último, tras presentar las conclusiones de los últimos dos capítulos, avanzaremos hacia donde se dirigen las próximas investigaciones del grupo.

El Capítulo 5 se centra en el estudio de los nanoresonadores unidimensionales, como los nanohilos de silicio, aplicados como sensores de masa. Este tipo de dispositivos presentan simetría axial lo que da lugar a la degeneración de los modos flexurales de vibración. La ruptura de su simetría provoca la ruptura de la degeneración de los modos lo que podría ser de gran utilidad en su aplicación como sensor. Para predecir el comportamiento de los nanohilos ante una deposición, introduciremos el formalismo de Ritz basado en la teoría de elasticidad lineal bidimensional para pequeñas deformaciones. Aplicando la técnica de deposición de carbono por haz de electrones, se muestran los nuevos paradigmas para la detección que presentan estos dispositivos, como son la ruptura de la degeneración o la rotación de los planos de vibración. Además se estudia su sensibilidad tanto a la masa como a la rigidez mecánica de las partículas adsorbidas.

En el Capítulo 6 se muestran, por primera vez, efectos optomecánicos en objetos nanométricos como nanohilos de silicio. Esto es posible mediante la explotación de las resonancias ópticas, asociadas al confinamiento de la luz en estructuras con dimensiones por debajo de la longitud de onda, y el efecto fototérmico que se produce al depositar una fina capa de oro sobre los nanohilos, lo que induce una fuerza de retroalimentación. Esta fuerza puede producir el enfriamiento o la amplificación del movimiento del oscilador, lo que disminuye su energía o aumenta su sensibilidad, respectivamente. Experimentalmente se ha logrado alcanzar temperaturas efectivas inferiores a 50 K partiendo de la temperatura ambiente; y una estabilidad en frecuencia de 1 ppm, correspondiente a sensibilidades del orden de zeptogramos. Nuestros resultados experimentales están en excelente acuerdo con los cálculos numéricos y la teoría desarrollada durante el capítulo.

REFERENCIAS

1. Whitesides, G.M. "*The 'right' size in nanobiotechnology*" Nature Biotechnology, **21**, 10 (2003).
2. Waggoner, P.S., Craighead, H.G. "*Micro- and nanomechanical sensors for environmental, chemical, and biological detection*" Lab on a Chip, **7**, 10 (2007).
3. Hempen, C., Karst, U. "*Labeling strategies for bioassays*" Analytical and Bioanalytical Chemistry, **384**, 3 (2006).
4. Cooper, M.A. "*Label-free screening of bio-molecular interactions*" Analytical and Bioanalytical Chemistry, **377**, 5 (2003).
5. Homola, J., Yee, S.S., Gauglitz, G. "*Surface plasmon resonance sensors: review*" Sensors and Actuators B-Chemical, **54**, 1-2 (1999).
6. Becker, B., Cooper, M.A. "*A survey of the 2006-2009 quartz crystal microbalance biosensor literature*" Journal of Molecular Recognition, **24**, 5 (2011).
7. Allen, B.L., Kichambare, P.D., Star, A. "*Carbon nanotube field-effect-transistor-based biosensors*" Advanced Materials, **19**, 11 (2007).
8. Boisen, A., Dohn, S., Keller, S.S., Schmid, S., Tenje, M. "*Cantilever-like micromechanical sensors*" Reports on Progress in Physics, **74**, 3 (2011).
9. Walker, J.A. "*The future of MEMS in telecommunications networks*" Journal of Micromechanics and Microengineering, **10**, 3 (2000).
10. O'Connell, A.D., Hofheinz, M., Ansmann, M., Bialczak, R.C., Lenander, M., Lucero, E., Neeley, M., Sank, D., Wang, H., Weides, M., Wenner, J., Martinis, J.M., Cleland, A.N. "*Quantum ground state and single-phonon control of a mechanical resonator*" Nature, **464**, 7289 (2010).
11. Binnig, G., Quate, C.F., Gerber, C. "*Atomic force microscope*" Physical Review Letters, **56**, 9 (1986).
12. Thundat, T., Warmack, R.J., Chen, G.Y., Allison, D.P. "*Thermal and ambient-induced deflections of scanning force microscope cantilevers*" Applied Physics Letters, **64**, 21 (1994).
13. McKendry, R., Zhang, J.Y., Arntz, Y., Strunz, T., Hegner, M., Lang, H.P., Baller, M.K., Certa, U., Meyer, E., Guntherodt, H.J., Gerber, C. "*Multiple label-free biodetection and quantitative DNA-binding assays on a nanomechanical cantilever array*" Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, **99**, 15 (2002).
14. Gfeller, K.Y., Nugaeva, N., Hegner, M. "*Rapid biosensor for detection of antibiotic-selective growth of Escherichia coli*" Applied and Environmental Microbiology, **71**, 5 (2005).
15. Naik, A.K., Hanay, M.S., Hiebert, W.K., Feng, X.L., Roukes, M.L. "*Towards single-molecule nanomechanical mass spectrometry*" Nature Nanotechnology, **4**, 7 (2009).

16. Goeders, K.M., Colton, J.S., Bottomley, L.A. "*Microcantilevers: Sensing chemical interactions via mechanical motion*" Chemical Reviews, **108**, 2 (2008).
17. Ramos, D., Tamayo, J., Mertens, J., Calleja, M. "*Photothermal excitation of microcantilevers in liquids*" Journal of Applied Physics, **99**, 12 (2006).
18. Okamoto, H., Ito, D., Onomitsu, K., Sanada, H., Gotoh, H., Sogawa, T., Yamaguchi, H. "*Vibration Amplification, Damping, and Self-Oscillations in Micromechanical Resonators Induced by Optomechanical Coupling through Carrier Excitation*" Physical Review Letters, **106**, 3 (2011).
19. Godin, M., Bryan, A.K., Burg, T.P., Babcock, K., Manalis, S.R. "*Measuring the mass, density, and size of particles and cells using a suspended microchannel resonator*" Applied Physics Letters, **91**, 12 (2007).
20. Burg, T.P., Godin, M., Knudsen, S.M., Shen, W., Carlson, G., Foster, J.S., Babcock, K., Manalis, S.R. "*Weighing of biomolecules, single cells and single nanoparticles in fluid*" Nature, **446**, 7139 (2007).
21. Chaste, J., Eichler, A., Moser, J., Ceballos, G., Rurali, R., Bachtold, A. "*A nanomechanical mass sensor with yoctogram resolution*" Nature Nanotechnology, (2012).
22. Li, M., Myers, E.B., Tang, H.X., Aldridge, S.J., McCaig, H.C., Whiting, J.J., Simonson, R.J., Lewis, N.S., Roukes, M.L. "*Nanoelectromechanical Resonator Arrays for Ultrafast, Gas-Phase Chromatographic Chemical Analysis*" Nano Letters, **10**, 10 (2010).
23. Feng, X.L., He, R., Yang, P., Roukes, M.L. "*Very high frequency silicon nanowire electromechanical resonators*" Nano Letters, **7**, 7 (2007).
24. Belov, M., Quidron, N.J., Sharma, S., Hiebert, W.K., Kamins, T.I., Evoy, S. "*Mechanical resonance of clamped silicon nanowires measured by optical interferometry*" Journal of Applied Physics, **103**, 7 (2008).
25. Spletzer, M., Raman, A., Wu, A.Q., Xu, X., Reifenger, R. "*Ultrasensitive mass sensing using mode localization in coupled microcantilevers*" Applied Physics Letters, **88**, 25 (2006).
26. Spletzer, M., Raman, A., Sumali, H., Sullivan, J.P. "*Highly sensitive mass detection and identification using vibration localization in coupled microcantilever arrays*" Applied Physics Letters, **92**, 11 (2008).

Capítulo 1

Teoría de resonadores nanomecánicos

En este primer capítulo se exponen los fundamentos teóricos de los resonadores nanomecánicos y su aplicación como sensores de masa. Con el fin de llegar al modelo de Euler-Bernouilli o modelo continuo, se introducirá brevemente la teoría de la elasticidad y en particular, su aplicación a deflexiones de palancas delgadas. Una vez deducida la ecuación dinámica de Euler-Bernouilli, se resolverá tanto espacial como temporalmente para el caso más simple, sin fuerzas externas ni disipación. De esta forma se obtendrán tanto las formas como las frecuencias propias de los modos flexurales de vibración.

A continuación se presentará el modelo del oscilador armónico y su equivalencia con el modelo continuo. Este modelo nos será de gran utilidad en el estudio de resonadores acoplados. Además, con él introduciremos la disipación de energía en los resonadores, así como su respuesta ante una fuerza externa variable en el tiempo. En este punto, se estudiará el efecto de la adsorción de partículas sobre la frecuencia de resonancia. Para predecir estos cambios de forma precisa se utilizará el método de Rayleigh. Además, se definirá la sensibilidad y el límite de detección en masa de nuestros sensores.

Por último, se explicará el concepto de ruido termomecánico a través del teorema de fluctuación-disipación. Este nos dice que nuestros resonadores fluctúan sin necesidad de fuerzas externas, por el hecho de encontrarse a cierta temperatura. El movimiento debido al ruido termomecánico nos proporciona la forma más natural de caracterizar la dinámica de nuestros resonadores, por ser debido a fuerzas sin correlación espacial ni temporal. La mayoría de las medidas realizadas durante este trabajo son precisamente medidas de este ruido. Además, determina el último límite de detección cuando el resto de fuentes de ruido son minimizadas.

1.1. INTRODUCCIÓN A LA TEORÍA DE LA ELASTICIDAD

Las ecuaciones fundamentales de la teoría de la elasticidad fueron establecidas por Cauchy y Poisson a principios del siglo XIX. Por deformaciones elásticas se entienden aquellas en las que el sólido recupera su forma inicial cuando las fuerzas que la provocan dejan de actuar[1, 2]. En esta primera sección se introduce el tensor deformación y el tensor de tensiones en sólidos. A continuación, se presentan las ecuaciones termodinámicas de las deformaciones en sólidos, a partir de las cuales se deduce la ley de Hooke.

1.1.1. Tensor de deformación y de tensiones en sólidos

La distancia entre dos puntos de un sólido infinitesimalmente próximos es

$$|d\vec{r}| = \sqrt{dx_i dx_i}$$

Siendo $i=1,2,3$, $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$; y utilizando el convenio de Einstein de índices repetidos, que se usará a lo largo de toda la tesis[3]. Cuando un sólido se encuentra bajo la acción de fuerzas aplicadas, todos los puntos se desplazan, pudiendo cambiar tanto de forma como de volumen. El desplazamiento de los puntos del sólido, \vec{u} , será $\vec{u} = \vec{r}' - \vec{r}$ (Figura 1.1).

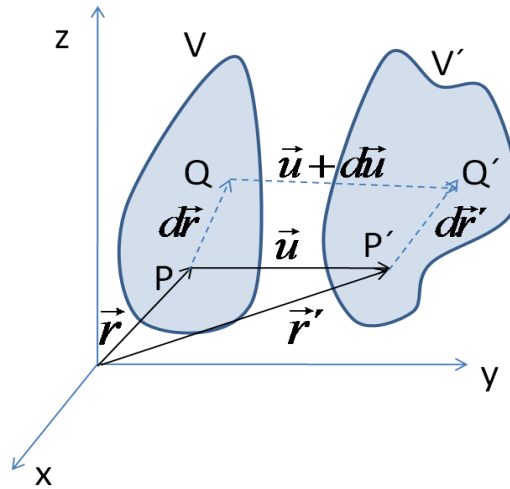


Figura 1.1. Esquema de una deformación general en un sólido.

La distancia entre esos mismos puntos será ahora

$$|d\vec{r}'| = \sqrt{dx'_i dx'_i} = \sqrt{(dx_i + du_i)(dx_i + du_i)}$$

Sustituyendo $du_i = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} dx_j$ y aplicando la notación $u_{i,j} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$, se obtiene

$$|d\vec{r}'|^2 = |d\vec{r}|^2 + 2u_{i,j}dx_i dx_j + u_{i,j}u_{i,k}dx_j dx_k$$

lo cual puede expresarse como

$$|d\vec{r}'|^2 = |d\vec{r}|^2 + 2\varepsilon_{ij}dx_i dx_j$$

donde ε_{ij} son las componentes del tensor deformación, $\boldsymbol{\varepsilon}$, definidas como

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i} + u_{k,i}u_{k,j}) \quad (1.1)$$

Por definición, el tensor de deformación es simétrico y por tanto diagonalizable. Esto implica que en cualquier punto del sólido existe un sistema de coordenadas, ejes principales, en el que solo las componentes diagonales del tensor de deformación son distintas de cero. En general, no todos los puntos del sólido tendrán los mismos ejes principales.

Las deformaciones en un sólido suelen ser pequeñas, lo que normalmente conlleva que las componentes del vector desplazamiento también lo sean y por tanto se pueden despreciar los términos de segundo orden en la ecuación (1.1) y obtener la ecuación en la que se basa la teoría de la elasticidad lineal

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (1.2)$$

Consideremos una región de un sólido en equilibrio mecánico, es decir, donde tanto la resultante de las fuerzas como la de los momentos que actúan sobre esta región son nulas. Si una fuerza externa produce una deformación, aparecerán fuerzas que tienden a devolverlo al equilibrio a las que llamaremos tensiones internas. El origen de las tensiones internas son las fuerzas moleculares, por lo que se pueden considerar como fuerzas de corto alcance. La fuerza total que se ejerce sobre la región del sólido se puede expresar como $\int_V \vec{F} dV$, donde \vec{F} es la fuerza por elemento de volumen dV . Como es igual a la suma de las tensiones internas que ejerce el resto del sólido sobre la región considerada, y por tratarse estas de fuerzas de corto alcance, la integral de volumen se podrá expresar como una integral de superficie. Por tanto, por el teorema de Gauss o de la divergencia, \vec{F} será la divergencia de un tensor de segundo orden

$$\vec{F} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (1.3)$$

donde $\boldsymbol{\sigma}$ se denomina tensor de tensiones y por definición cumple

$$\int_V \vec{F} dV = \int_V \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} dV = \int_A \sigma_{ij} dn_j$$

siendo dn_i las componentes del vector normal al elemento de superficie, $d\vec{n}$.

Por otro lado, el momento de las fuerzas que actúan sobre una región del sólido se define como, $\vec{M} = \vec{F} \times \vec{r}$. Por lo que sus componentes son

$$M_i = \epsilon_{ijk} \int_V F_j x_k dV$$

Donde ϵ_{ijk} es el operador Levi-Civita, que toma los valores

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{si } (i, j, k) \text{ es una permutación par de } (1, 2, 3) \\ -1 & \text{si } (i, j, k) \text{ es una permutación impar de } (1, 2, 3) \\ 0 & \text{en otros casos, donde } i = j \text{ o } j = k \text{ o } k = i \end{cases}$$

Usando la ecuación (1.3) se obtiene[1]

$$M_i = \sum_l \left[\int_V \frac{\partial(\sigma_{jl}x_k - \sigma_{kl}x_j)}{\partial x_l} dV - \int_V \left(\sigma_{jl} \frac{\partial x_k}{\partial x_l} - \sigma_{kl} \frac{\partial x_j}{\partial x_l} \right) dV \right]$$

y aplicando el teorema de la divergencia y que $\frac{\partial x_i}{\partial x_j} = \delta_{ij}$, siendo δ_{ij} la delta de Kroneker

$$M_i = \left[\int_A (\sigma_{jl}x_k - \sigma_{kl}x_j) dn_l - \int_V (\sigma_{jk} - \sigma_{kj}) dV \right]$$

Al igual que para el caso de la fuerza total, la integral de volumen debe poder convertirse en una integral de superficie, con lo cual se deduce que el tensor de tensiones es simétrico, $\sigma_{ik} = \sigma_{ki}$, y las componentes del momento finalmente se expresan como

$$M_i = \epsilon_{ijk} \int_A \sigma_{jl} x_k dn_l \quad (1.4)$$

1.1.2. Termodinámica de las deformaciones

El trabajo realizado por las tensiones internas, se obtiene integrando sobre el volumen el producto de la fuerza por el desplazamiento

$$\int_V \delta \mathcal{R} dV = \int_V F_i \delta u_i dV = \int_V \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \delta u_i dV$$

Integrando por partes y teniendo en cuenta las propiedades de simetría del tensor de tensiones se obtiene

$$\int_V \delta \mathcal{R} dV = - \int_V \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} dV$$

El cambio de energía interna se define como la diferencia entre el calor adquirido y el trabajo realizado por las tensiones internas

$$dU = dQ - d\mathcal{R}$$

Tratándose de un proceso termodinámicamente reversible, es decir, en el que la deformación ocurre tan lentamente que el cuerpo está en equilibrio termodinámico con el exterior en todo momento, este calor puede calcularse como $dQ = TdS$, siendo T la temperatura y S la entropía y por tanto

$$dU = TdS + \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} \quad (1.5)$$

Formula que se conoce como relación fundamental de la termodinámica de deformaciones en sólidos. La energía libre del sólido se define como, $\mathcal{F} = U - TS$, por lo que

$$d\mathcal{F} = -SdT + \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} \quad (1.6)$$

A partir de las ecuaciones (1.5) y (1.6), se pueden obtener las componentes del tensor de tensiones derivando U y \mathcal{F} con respecto a las componentes del tensor de deformaciones, a entropía o a temperatura constante respectivamente

$$\sigma_{ik} = \left(\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varepsilon_{ij}} \right)_S = \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \varepsilon_{ij}} \right)_T \quad (1.7)$$

Por lo tanto, conociendo la energía libre del cuerpo, \mathcal{F} , como función del tensor de deformación, se obtendrán las ecuaciones generales para deformaciones en sólidos.

1.1.3. Ley de Hooke

Se puede demostrar que la energía libre de un sólido, \mathcal{F} , expresada en serie de potencias de ε_{ij} , a segundo orden es [1]

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 + \frac{\lambda}{2} \sum_i \varepsilon_{ii}^2 + \mu \sum_{i,j} \varepsilon_{ij}^2$$

Los coeficientes λ y μ se conocen como los coeficientes de Lamé. Teniendo en cuenta que toda deformación se puede expresar como la suma de una deformación de cizalla, en la cual el volumen no cambia, y una compresión hidrostática, en la cual la forma no varía, se puede usar la siguiente identidad

$$\varepsilon_{ij} = \sum_k \left(\left(\varepsilon_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \varepsilon_{kk} \right) + \frac{1}{3} \delta_{ij} \varepsilon_{kk} \right)$$

y obtener finalmente para la expresión de la energía libre

$$\mathcal{F} = \sum_{i,j,k} \left(\mu \left(\varepsilon_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \varepsilon_{kk} \right)^2 + \frac{K}{2} \varepsilon_{kk}^2 \right) \quad (1.8)$$

donde K y μ serán el módulo de compresión hidrostática y modulo de rigidez. Estos cumplen que son siempre positivos y están relacionados con los coeficientes de Lamé por $K = \lambda + \frac{2}{3}\mu$. A partir de la ecuación (1.8) se obtiene el diferencial de la energía libre

$$d\mathcal{F} = \sum_k \left[2\mu \left(\varepsilon_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \varepsilon_{kk} \right) + K \delta_{ij} \varepsilon_{kk} \right] d\varepsilon_{ij}$$

Y teniendo en cuenta la ecuación (1.7), finalmente se obtiene que las componentes del tensor de tensiones, en un cuerpo isótropo, están relacionadas con las componentes del tensor de deformación a través de

$$\sigma_{ij} = \sum_k \left[2\mu \left(\varepsilon_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \varepsilon_{kk} \right) + K \delta_{ij} \varepsilon_{kk} \right] \quad (1.9)$$

Como se puede apreciar, cuando la deformación es puramente de cizalla o una compresión hidrostática, la relación entre σ_{ij} y ε_{ij} está determinada directamente por el modulo de rigidez o el de compresión hidrostática respectivamente. También se puede obtener la ecuación inversa, utilizando $\sum_i \varepsilon_{ii} = \sum_i \frac{1}{3K} \sigma_{ii}$ y sustituyendo en la ecuación (1.9)

$$\varepsilon_{ij} = \sum_k \left[\frac{1}{2\mu} \left(\sigma_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \sigma_{kk} \right) + \frac{1}{9K} \delta_{ij} \sigma_{kk} \right] \quad (1.10)$$

Expresión conocida como ley de Hooke. Utilizando las relaciones $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$ y $K = \frac{E}{3(1-2\nu)}$, donde ν es el coeficiente de poisson y E el módulo de Young, se obtienen las expresiones más habituales para la energía libre y las relaciones entre el tensor deformación y el de tensiones

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 + \sum_{i,j,k} \frac{E}{2(1+\nu)} \left(\varepsilon_{ij}^2 + \frac{\nu}{1-2\nu} \varepsilon_{kk}^2 \right) \quad (1.11)$$

$$\sigma_{ij} = \frac{E}{1+\nu} \left(\varepsilon_{ij} + \frac{\nu}{1-2\nu} \sum_k \varepsilon_{kk} \delta_{ij} \right) \quad (1.12)$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{E} \left((1+\nu) \sigma_{ij} - \nu \sum_k \sigma_{kk} \delta_{ij} \right) \quad (1.13)$$

1.2. MODELO DE EULER-BERNOUILLI

En la siguiente sección se presentará el modelo de Euler-Bernouilli, uno de los modelos usados para modelizar la respuesta dinámica de los resonadores nanomecánicos. En primer lugar, se aplicará la ley de Hooke al caso particular de deflexiones en palancas y a partir de las ecuaciones del equilibrio, se deducirá la ecuación dinámica de Euler-Bernouilli. A continuación, se resolverá tanto espacial como temporalmente, para el caso de tener uno de los extremos está fijo y el otro libre, obteniendo tanto la forma como la frecuencia de los modos flexurales de oscilación.

1.2.1. Deflexión en palancas

Se consideran palancas cuya longitud es mucho mayor que su anchura, y ambas mucho mayores que su espesor. Además, en este caso, la condición de pequeñas deformaciones no siempre implica desplazamientos pequeños, puesto que una pequeña deformación en la base puede producir grandes desplazamientos en la punta. Por tanto, para satisfacer la ecuación (1.2) y restringirnos a la teoría de la elasticidad lineal, se debe cumplir que las deflexiones son mucho menores que su espesor.

Cuando una palanca se flexiona, siempre existe una superficie de la palanca, a la que llamaremos superficie neutra, en la cual la deformación será nula (Figura 1.2). Evidentemente, en el caso de tener un material isótropo y uniforme, estará situada a la mitad del espesor de la palanca.

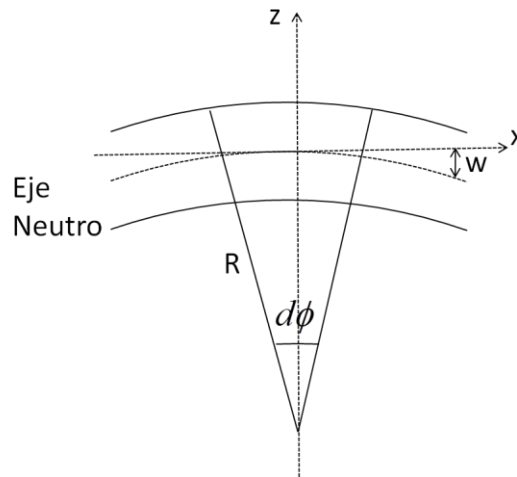


Figura 1.2. Sección longitudinal de una palanca sometida a una deflexión elástica en el eje z .

En esta aproximación, los desplazamientos de los puntos de esta superficie, $u_i^{(0)}$, describirán los del resto del sólido, u_i . Las secciones transversales de la palanca se mantendrán paralelas entre sí, y por tanto, el desplazamiento vertical de esta superficie, w , solo dependerá de la coordenada longitudinal, x . Los desplazamientos a lo largo de los otros ejes se consideran nulos por ser de segundo

orden. Las consideraciones geométricas anteriores nos permiten despreciar la coordenada y , por lo que podemos utilizar un modelo bidimensional y la superficie neutra pasa a ser un eje neutro. Finalmente tenemos que los desplazamientos a lo largo de los ejes para todos los puntos de la palanca se expresan como

$$u_x = u_x^{(0)} = 0 \quad ; \quad u_y = u_y^{(0)} = 0 \quad ; \quad u_z = u_z^{(0)} = w(x)$$

En el equilibrio, la fuerza externa aplicada sobre la superficie de la palanca que produce la deformación, deberá anularse por las fuerzas internas, por lo que las condiciones de contorno sobre la cara superior e inferior de la palanca son

$$F_i d\vec{n} - \sigma_{ij} dn_j = 0$$

Sustituyendo $dn_j = n_j d\vec{n}$ y teniendo en cuenta que por tratarse de una palanca delgada, la fuerza aplicada sobre la superficie para producir una deflexión será pequeña comparada con las tensiones internas generadas, tenemos que $\sigma_{ij} n_j = 0$. Y como las deflexiones son pequeñas, podemos considerar \vec{n} dirigido según el eje z , y por lo tanto, en ambas caras se cumple $\sigma_{xz} = \sigma_{yz} = \sigma_{zz} = 0$. Esta condición también se cumplirá en su interior al tratarse de palancas delgadas. Aplicando sobre estas condiciones y las ecuaciones (1.12) y (1.2) se obtiene

$$u_{x,z} = -u_{z,x} \quad ; \quad u_{y,z} = -u_{z,y} \quad ; \quad \varepsilon_{zz} = -\frac{\nu}{1-\nu}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})$$

Sustituyendo u_z por $w(x)$, de las dos primeras igualdades se deduce

$$u_x = -z \frac{\partial w(x)}{\partial x} \quad ; \quad u_y = 0$$

Y finalmente obtenemos que las componentes del tensor deformación y del tensor de tensiones son por tanto

$$\varepsilon_{xx} = -z \frac{\partial^2 w(x)}{\partial x^2} \quad ; \quad \varepsilon_{zz} = z \frac{\nu}{1-\nu} \frac{\partial^2 w(x)}{\partial x^2} \quad ; \quad \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{xy} = 0 \quad (1.14)$$

$$\sigma_{xz} = \sigma_{yz} = \sigma_{xy} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = 0 \quad ; \quad \sigma_{xx} = -z \frac{E}{1-\nu^2} \frac{\partial^2 w(x)}{\partial x^2} \quad (1.15)$$

Relacionando ambas, llegamos a la expresión de la ley de Hooke para el caso particular de deflexiones pequeñas en palancas

$$\sigma_{xx} = \frac{E}{1-\nu^2} \varepsilon_{xx} \quad (1.16)$$

También se puede expresar como

$$\sigma_{xx} = E^* \varepsilon_{xx} \quad (1.17)$$

Donde E^* es el modulo de elasticidad biaxial.

1.2.2. Ecuación de Euler-Bernoulli

Vamos a resumir brevemente las aproximaciones realizadas hasta ahora y que nos servirán para llegar a la ecuación de Euler-Bernoulli:

- Material isótropo, homogéneo y cuyo comportamiento es elástico
- Palancas delgadas. El espesor es mucho menor que la anchura, y ambas mucho menores que su longitud.
- Solo consideraremos deflexión, no torsión, por lo que el desplazamiento no variará a lo largo del eje y .
- Deflexiones pequeñas, mucho menores que el espesor. No habrá fuerzas de cizalla y por tanto, las diferentes secciones transversales de la palanca permanecerán paralelas entre sí.
- Tanto el espesor como el ancho de la palanca es uniforme a lo largo de su longitud (Figura 1.3).

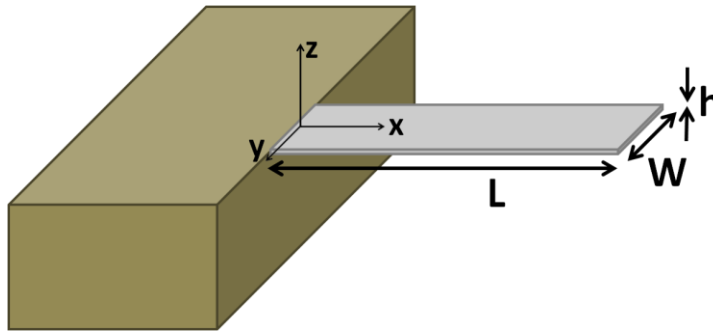


Figura 1.3. Esquema de una palanca delgada con el eje de coordenadas centrado a la mitad de su espesor y anchura en la base.

Al tratarse de un modelo unidimensional, podemos suponer sin pérdida de generalidad $E^* = E$. En el caso de no tener ni fuerzas ni momentos externos aplicados, el momento total, será igual al producido por las fuerzas internas, por lo que a partir de las ecuaciones (1.4) y (1.15), todas las componentes del momento se anulan excepto

$$M_y = - \iint z^2 E \frac{\partial^2 w(x)}{\partial x^2} dy dz \quad (1.18)$$

Teniendo en cuenta la definición del segundo momento de área o segundo momento de inercia, $I_y = \iint z^2 dydz$, se tiene

$$M_y = -EI_y \frac{\partial^2 w(x)}{\partial x^2} \quad (1.19)$$

Considerando el equilibrio de las fuerzas y momentos presentes en una sección de la palanca la fuerza total sobre la sección es (Figura 1.4)

$$\sum F_{int} = \frac{\partial F_z}{\partial x} dx \quad (1.20)$$

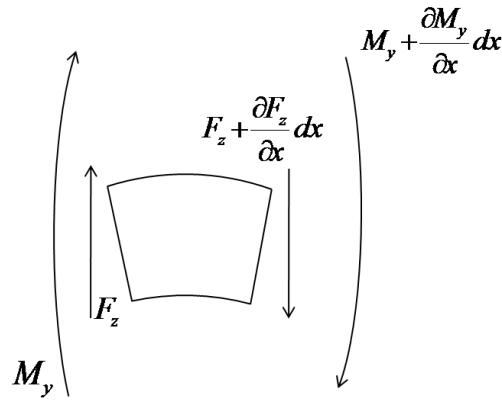


Figura 1.4. Fuerzas y momentos presentes en una sección longitudinal de la palanca.

Y la suma de momentos será igual a la suma de momentos internos y de los momentos generados por las fuerzas internas

$$\begin{aligned} \sum M_{int} &= \left(M_y + \frac{1}{2} \frac{\partial M_y}{\partial x} dx \right) - \left(M_y - \frac{1}{2} \frac{\partial M_y}{\partial x} dx \right) + \left(F_z + \frac{1}{2} \frac{\partial F_z}{\partial x} dx \right) \frac{dx}{2} - \\ &\left(F_z - \frac{1}{2} \frac{\partial F_z}{\partial x} dx \right) \frac{dx}{2} = \frac{\partial M_y}{\partial x} dx + F_z dx \end{aligned}$$

Como en el equilibrio $\sum M_{int} = 0$, se obtiene que la fuerza y el momento interno están relacionados por

$$F_z = -\frac{\partial M_y}{\partial x}$$

Y teniendo en cuenta la ecuación de equilibrio dinámico en ausencia de fuerzas externas, $\sum F_{int} = \rho A \frac{\partial^2 w(x,t)}{\partial t^2}$, y las ecuaciones (1.19) y (1.20), se llega a la ecuación dinámica de Euler-Bernoulli

$$\rho A \frac{\partial^2 w(x,t)}{\partial t^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(EI \frac{\partial^2 w(x,t)}{\partial x^2} \right) = 0 \quad (1.21)$$

que para el caso de tener una sección uniforme a lo largo de la palanca toma su forma más habitual y sencilla

$$\rho A \frac{\partial^2 w(x,t)}{\partial t^2} + EI \frac{\partial^4 w(x,t)}{\partial x^4} = 0 \quad (1.22)$$

1.2.3. Resolución espacial y temporal

Separando la parte temporal del desplazamiento de la parte espacial, $w(x,t) = \psi(x)e^{i\omega t}$, la ecuación (1.22) pasa a ser

$$EI \frac{\partial^4 \psi(x,\omega)}{\partial x^4} - \rho A \omega^2 \psi(x,\omega) = 0 \quad (1.23)$$

Aplicando el cambio de variable

$$k^4 = \frac{\rho A \omega^2}{EI} \quad (1.24)$$

la ecuación (1.23) se convierte en, $\frac{\partial^4 \psi(x,\omega)}{\partial x^4} - k^4 \psi(x,\omega) = 0$, cuyas soluciones son de la forma

$$\psi(x,\omega) = C_1 \cosh(kx) + C_2 \sinh(kx) + C_3 \cos(kx) + C_4 \sin(kx) \quad (1.25)$$

Siendo C_i , constantes determinadas por las condiciones de contorno. Para el caso de una palanca con un extremo libre y otro fijo las condiciones son que para el extremo fijo el desplazamiento y la pendiente son nulos, mientras que en el extremo libre son nulas la curvatura y su derivada. Para otros casos, como el de tener los dos extremos fijos, estas condiciones cambian y por tanto también lo hacen tanto la forma como la frecuencia de los modos [4]. Matemáticamente tenemos

$$\psi(0) = \frac{\partial \psi}{\partial x}(0) = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(L) = \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3}(L) = 0 \quad (1.26)$$

De las condiciones de contorno se deriva que $C_2 = C_4$ y $C_1 = -C_3$ y $\cosh(k_n L) \cos(k_n L) = -1$. Esta última ecuación, que no es resoluble analíticamente, se resuelve numéricamente obteniendo para los primeros modos de vibración que $\alpha_n = k_n L = 1.875, 4.694, 7.854 \dots$. Valores que relacionaremos con las frecuencias propias a través de la ecuación (1.24). Finalmente se obtiene la forma espacial de los modos

$$\psi_n(x) = A_n \left((\sin k_n x - \sinh k_n x) + \frac{(\cosh k_n L + \cos k_n L)}{(\sin k_n L - \sinh k_n L)} (\cos k_n x - \cosh k_n x) \right) \quad (1.27)$$

A la hora de normalizar esta función, se pueden tomar diferentes criterios[5-7], nosotros definimos A_n de forma que $\psi_n(x)$ sea adimensional, cumpliéndose $\int_0^L \psi_n(x) \psi_m(x) dx = L \delta_{nm}$, donde δ_{nm} es la delta de Kroneker y por tanto, los modos son ortogonales entre sí por ser autovectores. Los valores de A_n para los primeros modos de oscilación serán: $A_n = 0.7341, 1.0284, 1.000, \dots$ cumpliéndose $\psi_n(L) = -2(-1)^n$. La figura 1.5 muestra la forma de los 3 primeros modos flexurales de oscilación.

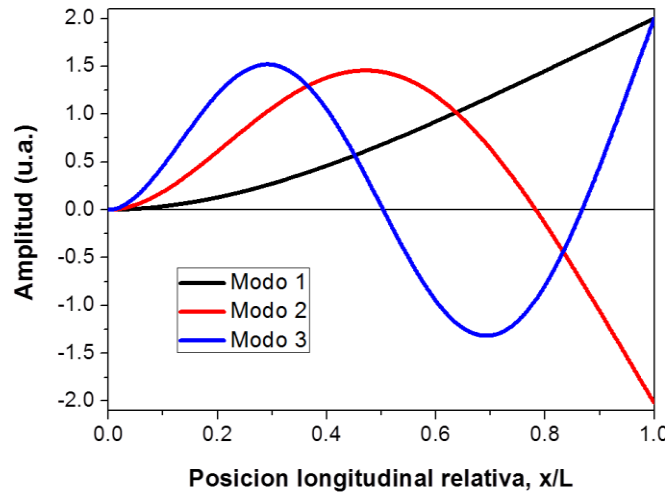


Figura 1.5. Forma de los 3 primeros modos flexurales de vibración de una palanca con un extremo fijo y otro libre.

La solución de la parte temporal se obtiene a partir de la ecuación (1.24)

$$\omega_n^2 = k_n^4 \frac{EI}{\rho A} = \frac{\alpha_n^4}{L^4} \frac{EI}{\rho A} \quad (1.28)$$

En una palanca de sección rectangular, el momento de inercia es $I = Wh^3/12$, donde W es la anchura y h el espesor. Por lo que se obtiene

$$\omega_n = \frac{h \alpha_n^2}{L^2} \sqrt{\frac{E}{12\rho}} \quad (1.29)$$

Como podemos ver, las frecuencias propias no dependen de la anchura de la palanca, pero sí de su longitud y espesor, así como del material que la compone. Finalmente, el desplazamiento de la palanca se puede expresar como

$$w(x, t) = \sum_n \psi_n(x) e^{i\omega_n t} \quad (1.30)$$

1.3. MODELO DEL OSCILADOR ARMÓNICO

A pesar de su simplicidad, el modelo del oscilador armónico es de gran utilidad para describir el comportamiento dinámico de resonadores nanomecánicos, y en concreto, a lo largo de esta tesis, se aplicará al estudio de resonadores nanomecánicos acoplados. Además, nos servirá para estudiar la respuesta de los resonadores a fuerzas dependientes del tiempo e introducir los efectos disipativos. Como veremos, este modelo es equivalente al modelo de Euler-Bernoulli pero despreciando la componente espacial.

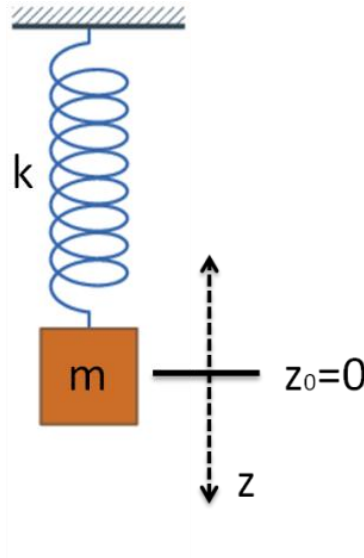


Figura 1.6. Modelo del oscilador armónico simple o muelle de masa puntual.

La Lagrangiana de un muelle con masa puntual es (Figura 1.6)

$$\mathcal{L} = E_c - E_p = \frac{1}{2}m\dot{z}^2 - \frac{1}{2}kz^2 \quad (1.31)$$

donde E_c es la energía cinética, E_p la energía potencial, k la constante elástica del muelle y m la masa. A partir de las ecuaciones de Lagrange se obtiene la ecuación del movimiento

$$m\ddot{z} = -kz \quad (1.32)$$

Suponiendo nuevamente un movimiento armónico, $z = Ae^{i\omega t}$, se obtiene que la frecuencia de resonancia es

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (1.33)$$

Hasta ahora no hemos considerado efectos disipativos. En general, los mecanismos de disipación presentes en un resonador son múltiples y aditivos[8]. El más importante de todos es el debido al rozamiento que se produce con el medio que rodea la palanca[9-12]. Este efecto suele ser aún más importante si el resonador se encuentra cerca de un sustrato[13, 14]. Cuando los resonadores se encuentran en vacío, la disipación por el medio se reduce y otros efectos disipativos pasan a ser más importantes, entre ellos se encuentran las pérdidas producidas en el extremo fijo[15], el amortiguamiento termoelástico[16] o el debido a las fricciones internas. Los efectos disipativos producen un retraso de la respuesta de la palanca, además de añadir un término de fuerza inercial debida a la masa añadida por el fluido[17, 18], de esta forma la ecuación (1.32) pasa a ser

$$(m + m')\ddot{z} + \gamma\dot{z} + kz = 0$$

En nuestro caso la mayoría de las medidas se realizarán en vacío, por lo que podemos despreciar el termino de la masa añadida por el medio, $m' = 0$, pero siempre existirán otras fuentes disipativas, por lo que $\gamma \neq 0$

$$m\ddot{z} + \gamma\dot{z} + kz = 0 \quad (1.34)$$

Se define el factor de calidad, Q , como la relación entre la energía almacenada y la disipada en cada ciclo de oscilación y se puede demostrar que está relacionado con el coeficiente de disipación a través de

$$Q = m\omega_0/\gamma \quad (1.35)$$

1.3.1. Respuesta en frecuencia

Para calcular la respuesta en frecuencia de un oscilador armónico amortiguado sometido a una fuerza armónica, $F(t) = F_0 e^{i\omega t}$, utilizaremos las soluciones de la ecuación homogénea. La ecuación diferencial en este caso es

$$m\ddot{z} + \gamma\dot{z} + kz = F_0 e^{i\omega t} \quad (1.36)$$

Aproximando de nuevo, $z(t) = Ae^{i\omega t}$ y definiendo la susceptibilidad mecánica, χ , como la relación entre la respuesta del oscilador y la de la fuerza de excitación en el espacio de Fourier

$$\hat{z}(\omega) = \chi(\omega) \hat{f}(\omega) \quad (1.37)$$

Donde $\hat{y}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} y(t) e^{-i\omega t} dt$. Obtenemos que la susceptibilidad mecánica de nuestro sistema viene dada por

$$\chi(\omega) = (-m\omega^2 + i\omega\gamma + k)^{-1} \quad (1.38)$$

La respuesta de nuestro resonador viene dada por

$$\hat{z}(\omega) = \frac{F_0/m}{\omega_0^2 - \omega^2 + \frac{i\omega_0\omega}{Q}} \quad (1.39)$$

Y por tanto, amplitud de oscilación es

$$A(\omega) = \frac{F_0/m}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \left(\frac{\omega_0\omega}{Q}\right)^2}} \quad (1.40)$$

De la ecuación (1.40), obtenemos que la amplitud no será máxima a su frecuencia propia, ω_0 , sino que la frecuencia de resonancia será

$$\omega_0' = \omega_0 \sqrt{1 + 1/(2Q)} \quad (1.41)$$

Aunque en nuestro caso, podemos suponer que la frecuencia de resonancia es aproximadamente igual a la frecuencia propia, $\omega_0' = \omega_0$, ya que $Q \gg 1$.

La figura 1.7 muestra esta amplitud en función del factor de calidad para una fuerza, masa y frecuencia de resonancia dadas. Podemos observar cómo influye el factor de calidad en la anchura de nuestro pico y por tanto en la resolución de la medida de la frecuencia de resonancia.

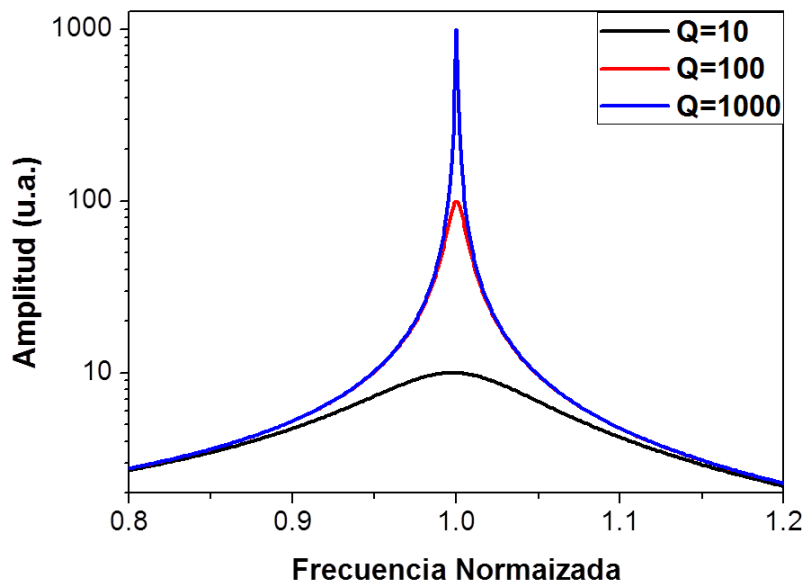


Figura 1.7. Representación de tres curvas de resonancia teóricas, con la misma frecuencia propia pero distinto factor de calidad (escala logarítmica).

El factor de calidad también puede calcularse a partir de la anchura a media altura del pico de resonancia (FWHM) a través de la siguiente expresión[19]

$$Q = \sqrt{3} \frac{\omega_0}{FWHM} \quad (1.42)$$

1.3.2. Relación entre el modelo del oscilador armónico y la ecuación de Euler-Bernoulli

La ecuación (1.34) también se puede obtener en su forma equivalente para el modelo de Euler-Bernoulli. Supongamos que tenemos una fuerza armónica $f(x, t) = \delta(x - L)F_0 e^{i\omega t}$, localizada en el extremo libre de la palanca

$$EI \frac{\partial^4 w(x, t)}{\partial x^4} - \gamma \frac{\partial w(x, t)}{\partial t} + \rho A \frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial t^2} = f(x, t) \quad (1.43)$$

La solución espacial de esta ecuación no varía con respecto a la dada en la ecuación (1.27), pero si lo hará la temporal, al igual que para el caso del oscilador armónico. Por tanto, teniendo en cuenta la solución espacial obtenida con el modelo de Euler-Bernoulli, podemos transformar la ecuación (1.40) y obtener finalmente la amplitud de oscilación en cada punto de la palanca es

$$A(\omega, x) = \sum_n \psi_n(x) \frac{F_0/m_n}{\sqrt{(\omega_n^2 - \omega^2)^2 + \left(\frac{\omega_n \omega}{Q_n}\right)^2}} \quad (1.44)$$

Donde $\omega_n^2 = \frac{k_n}{m_n}$ y $Q_n = m_n \omega_n / \gamma_n$, siendo k_n , m_n y γ_n la masa, rigidez y disipación efectiva de cada modo. Se puede demostrar que [5]

$$\begin{aligned} m_n &= \frac{1}{\psi_n(L)^2} \int_0^L \rho A \psi_n(x)^2 dx \\ k_n &= \frac{1}{\psi_n(L)^2} \int_0^L EI \frac{d^2 \psi_n(x)}{dx^2} dx \\ \gamma_n &= \frac{1}{\psi_n(L)^2} \int_0^L \gamma \psi_n(x)^2 dx \end{aligned} \quad (1.45)$$

Usando estas relaciones, podemos pasar fácilmente del modelo continuo al del oscilador armónico. Para el primer modo de oscilación tendremos $m_1 = 0.25 m$; $\gamma_1 = 0.25 \gamma$ y $k_1 = 3.09 \frac{EI}{L^3}$. Teniendo en cuenta estas cantidades efectivas, podemos pasar fácilmente del modelo del oscilador armónico, ecuación (1.33), al modelo de Euler-Bernoulli, ecuación (1.29).

1.4. EFECTO DE LA ADSORCIÓN DE PARTICULAS SOBRE LA FRECUENCIA DE RESONANCIA

El principio de funcionamiento de los resonadores nanomecánicos utilizados como sensores de masa es la medida de cambios en frecuencia de resonancia debido a la masa que añade la adsorción de moléculas sobre la superficie de la palanca. Utilizando la aproximación del oscilador armónico, si la masa añadida es pequeña en comparación a la masa del oscilador, aproximando a primer orden tenemos

$$\frac{\Delta\omega_n}{\omega_n} = -\frac{1}{2} \frac{\Delta m}{m_n} \quad (1.46)$$

Sin embargo, esta aproximación solo es válida para deposiciones pequeñas producidas en el extremo libre. En el resto de casos el cambio en frecuencia tendrá una dependencia con la posición de la partícula y por tanto, el modelo deja de ser válido[20]. Además, a medida que la miniaturización de los dispositivos ha avanzado, las dimensiones de las partículas detectadas han empezado a ser comparables al espesor de los resonadores, comenzando a afectar también a la rigidez del sistema, con lo que se necesita otro modelo más realista para predecir estos cambios[21, 22]. A continuación presentamos el método de Rayleigh, que utilizaremos cuando las suposiciones anteriores no se cumplan.

1.4.1. Método de Rayleigh

El método de Rayleigh consiste en igualar la energía potencial o energía elástica de deformación y cinética durante un ciclo de oscilación, $\langle E_c \rangle = \langle E_p \rangle$. La energía elástica de deformación por unidad de volumen se define como

$$E_p = \frac{1}{2} \varepsilon_{ik} \sigma_{ik} \quad (1.47)$$

Utilizando el modelo de Euler-Bernoulli tenemos que

$$\langle \int_0^L \frac{1}{2} \rho S \dot{w}^2(x, t) dx \rangle = \langle \int_0^L \frac{1}{2} EI \left(\frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial x^2} \right)^2 dx \rangle \quad (1.48)$$

Por tanto, conociendo la forma de los modos, ecuación (1.27), que suponemos no variará aun después de la deposición, y teniendo en cuenta que por ser armónico, $\dot{w}(x, t) = (i\omega)w(x, t)$, obtenemos que la frecuencia de resonancia de la palanca es

$$\omega^2 = \frac{EI \int_0^L \left(\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} \right)^2 dx}{\rho S \int_0^L \psi(x)^2 dx} \quad (1.49)$$

De nuevo, formula equivalente a la obtenida por el modelo de Euler-Bernoulli.

Hasta ahora, hemos supuesto una palanca compuesta por un material homogéneo e isotrópico y cuya sección era uniforme. Cuando depositamos algo sobre ella, estas consideraciones no son válidas y por tanto modificando la ecuación (1.49) obtenemos que la nueva frecuencia de resonancia será

$$\omega'^2 = \frac{\int_0^L E'(x) I'(x) \left(\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} \right)^2 dx}{\int_0^L \rho'(x) S'(x) \psi(x)^2 dx} \quad (1.50)$$

Sin entrar en detalle, vamos a analizar esta fórmula y por tanto, los efectos que puede causar una deposición sobre una palanca. En primer lugar, destacar que la nueva frecuencia de resonancia dependerá de la posición en la que se produzca la deposición y por tanto, donde se vean modificadas la densidad, sección, módulo de Young y momento de inercia. Centrándonos en el primer modo de oscilación, tendremos que si la deposición se produce en el extremo libre, donde la curvatura es nula y la amplitud es máxima, el término de rigidez no se verá afectado, mientras el término de masa sí aumentará, con lo que la frecuencia de resonancia disminuirá. Por otro lado, cuando la deposición se produce en la base, donde la amplitud es nula y la curvatura es máxima, el término de masa se mantendrá inalterado, mientras que el término de rigidez aumentará y por tanto, la frecuencia de resonancia crecerá. Un tratamiento análogo podría hacerse con el resto de los modos de oscilación, donde los efectos de masa aparecen en los antinodos y los efectos de rigidez en los nodos.

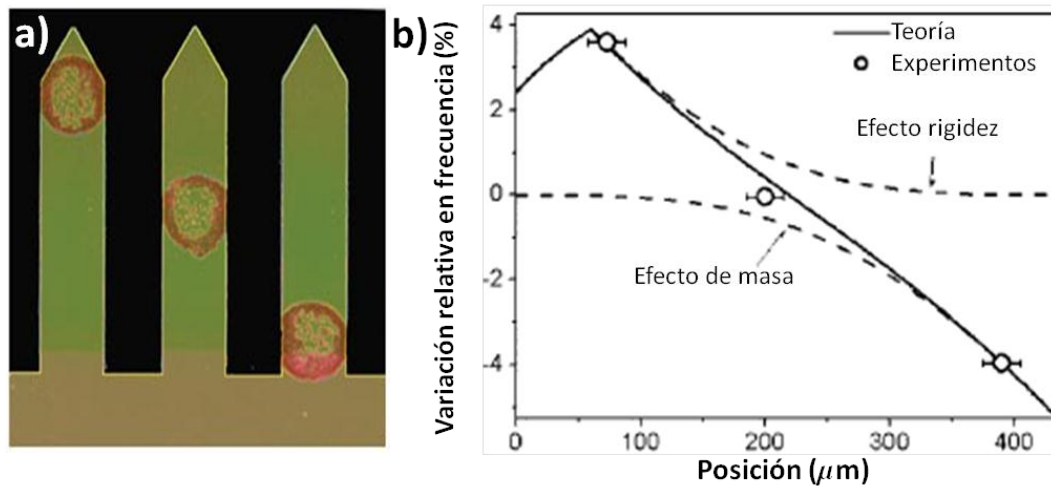


Figura 1.8. Estudio del efecto de la absorción de bacterias sobre micropalancas. (a). Imagen óptica de 3 palancas de silicio en las cuales se han depositado bacterias en diferentes posiciones. La longitud, anchura y espesor de las palancas es 500 μm, 100 μm y 1 μm, respectivamente. (b) Cálculo teórico de la variación relativa en frecuencia frente a la posición longitudinal de adsorción de las bacterias. Las líneas punteadas representan los efectos por de masa y rigidez por separado. La línea continua es la suma de ambos efectos. La gráfica también muestra los valores experimentales.

En anteriores trabajos del laboratorio [23, 24], se ha demostrado la validez de este método para predecir los cambios en frecuencia de distintos modos de vibración, depositando bacterias en diferentes zonas de una micropalanca (Figura 1.8). Además se ha demostrado que la detección de cambios en la rigidez de las palancas puede ser incluso más efectiva que la medida de cambios de masa[25]. Para ello se probaron dos tipos de dispositivos diferentes en la detección de ADN, unos en los que la superficie sensora se localizaba en la punta y otros en la base. Los resultados probaron que solo los dispositivos con la superficie sensora en la base eran eficientes en la detección de la hibridación.

1.4.2. Sensibilidad y límite de detección

La sensibilidad, \mathcal{R} , de nuestros resonadores frente a un estímulo externo, se define como la variación de la frecuencia de resonancia debido a éste. En el caso de considerar una adsorción de moléculas, la respuesta vendrá dada por la suma de los efectos de masa y rigidez.

$$\mathcal{R} = \frac{\partial \omega_n}{\partial m_n} + \frac{\partial \omega_n}{\partial k_n} \quad (1.51)$$

Tradicionalmente se ha usado la aproximación del oscilador armónico, ecuación (1.43), por lo que se ha considerado que la sensibilidad de los resonadores ante una masa añadida es

$$\mathcal{R} = \frac{\partial \omega_n}{\partial m_n} = -\frac{1}{2} \frac{\omega_n}{m_n} \quad (1.52)$$

Esto implica que el uso de dispositivos más pequeños, con frecuencia de resonancia más alta y masa más baja, mejora la sensibilidad de nuestros sensores, razón por la cual la miniaturización de los dispositivos es tan importante.

Por otro lado definimos el límite de detección en masa[26, 27] como la mínima variación de masa detectable

$$\delta M = \frac{\partial m_n}{\partial \omega_n} \delta \omega_n = \mathcal{R}^{-1} \delta \omega_n = -2 \frac{m_n}{\omega_n} \delta \omega_n \quad (1.53)$$

donde $\delta \omega_n$ es el mínimo cambio en frecuencia medible. En general, $\delta \omega_n$, estará determinado por el ruido eléctrico, las fluctuaciones en temperatura o la adsorción y desorción de partículas [28]. En el caso de realizar experimentos exsitu, $\delta \omega_n$ estará limitado por la adsorción inespecífica producida al cambiar el resonador de medio, así como los cambios de humedad o temperatura que se produzcan de una a otra medida. Además, aunque se minimicen todos estos tipos de ruido, siempre quedará el ruido termomecánico, que explicaremos a continuación y que establecerá el último límite de detección o límite termomecánico de nuestros dispositivos.

1.5. RUIDO TERMOMECAÁNICO Y LÍMITE DE DETECCIÓN

Llamamos ruido termomecánico al movimiento de nuestro resonador causado por la transferencia de energía de las partículas que lo rodean debido al movimiento térmico de estas[29, 30]. En el caso de encontrarse en vacío, se entiende que el movimiento es producido por las propias vibraciones de los átomos que conforman el resonador. El ruido termomecánico, como veremos cuando estudiemos resonadores acoplados, nos proporciona la forma más natural de caracterizar a los resonadores, ya que es debido a fuerzas sin correlación espacial ni temporal. Es por esto, por lo que a lo largo de esta tesis la mayoría de las medidas de la oscilación de nuestros resonadores serán precisamente medidas del ruido termomecánico. Además, el ruido termomecánico establece el último límite de detección cuando el resto de fuentes de ruido son minimizadas. Una explicación más detallada de este mecanismo y de la respuesta de los resonadores se obtiene del teorema de fluctuación-disipación[31].

1.5.1. Teorema Fluctuación-disipación

El teorema de fluctuación-disipación nos dice que todo sistema que disipa energía es necesariamente una fuente de ruido, lo contrario, normalmente, también es cierto. Pongamos el ejemplo de un circuito eléctrico[32]. Cada elemento del circuito tendrá una impedancia eléctrica cuya parte real será distinta de cero, es decir, todo elemento del circuito disipa energía. Por tanto, según el teorema de fluctuación-disipación, todo elemento será una fuente de ruido, esto es, se producirán fluctuaciones en el voltaje y en la intensidad sobre ese elemento. Esta fluctuación estará determinada por la parte real de la impedancia y por la temperatura a la que se encuentre el dispositivo. Este teorema también es aplicable a resonadores que disipen energía, es decir, cuyo factor de calidad es finito. Al contrario que en el elemento del circuito eléctrico, en un resonador el ruido termomecánico no es un ruido blanco, constante en frecuencia, sino que presenta máximos en las resonancias. Para representar esta distribución de la energía, se utiliza la densidad espectral en el espacio de las frecuencias, que para una variable $X(\omega)$ se define como

$$S_X = \int_{-\infty}^{\infty} |X(\omega)|^2 d\omega \quad (1.54)$$

El origen de la disipación es la termalización del movimiento del resonador, así que, en ausencia de fuerzas externas, la energía media de cada modo es $\langle E_n \rangle = K_B T$. Nos restringimos al caso de altas temperaturas o frecuencias bajas en el que $K_B T \gg \hbar \omega$. Esta termalización es debida a la presencia de un ruido en la fuerza $f_N(x, t)$ por unidad de longitud, que para cada punto del resonador tendrá la misma densidad espectral, pero no estará correlacionado ni espacial ni temporalmente. Esta fuerza también es llamada fuerza de Langevin. Si se supone que la fuerza de Langevin es proporcional a la forma de los modos, se tiene

$$f_N(x, t) = \frac{1}{L} \sum_{n=1}^{\infty} f_{N_n}(t) \Psi_n(x)$$

La fuerza de Langevin asociada a cada modo, $f_{N_n}(t)$, tiene una densidad espectral blanca para la frecuencia y por lo tanto la densidad espectral de la amplitud de oscilación será

$$S_{a_n} = \frac{1}{(\omega_n^2 - \omega^2)^2 + (\frac{\omega_n \omega}{Q})^2} \frac{S_{f_n}(\omega)}{m_n^2} \quad (1.55)$$

S_{a_n} estará relacionada con el desplazamiento cuadrático medio de la palanca a través de

$$\langle w^2 \rangle = \int_0^{\infty} S_{a_n}(\omega) d\omega \quad (1.56)$$

La energía cinética del modo n asociada a una densidad espectral S_{a_n} será por tanto

$$\langle E_c \rangle = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \int_0^L \rho S \omega^2 S_{a_n}(\omega) \Psi_n^2(x) dx d\omega \approx \frac{\pi}{4} \frac{QL^2}{\omega_n} \frac{S_{f_n}}{m_n}$$

Y como ésta, por el teorema de equipartición de energía, deberá ser igual a $\langle E_c \rangle = \frac{1}{2} K_B T$, para alcanzar el equilibrio térmico, finalmente tenemos, que la densidad espectral debido a las fuerzas térmicas es

$$S_{f_n} = \frac{4K_B T m_n \omega_n}{Q_n} \quad (1.57)$$

Finalmente, la densidad espectral de la amplitud de oscilación

$$S_{a_n} = \frac{1}{(\omega_n^2 - \omega^2)^2 + (\frac{\omega_n \omega}{Q})^2} \frac{4K_B T \omega_n}{m_n Q_n} \quad (1.58)$$

Y por tanto la amplitud de oscilación por ruido termomecánico es

$$\langle w^2 \rangle^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{(\omega_n^2 - \omega^2)^2 + (\frac{\omega_n \omega}{Q})^2}} \sqrt{\frac{4K_B T B \omega_n}{m_n Q_n}} \quad (1.59)$$

donde B, es el ancho de banda, definido como el inverso del tiempo de adquisición $B = t_{adq}^{-1}$. La ecuación (1.59) es formalmente idéntica a la obtenida para la respuesta de un oscilador armónico a una fuerza variable, ecuación (1.40), siendo la fuerza efectiva del ruido termomecánico, $F_0 = \sqrt{\frac{4K_B T B}{\gamma_n}}$.

1.5.2. Ruido en amplitud y en frecuencia

Como dijimos antes, el ruido termomecánico constituye el límite fundamental de detección de los resonadores. Es decir, si lo que medimos son cambios de amplitud al excitar un resonador con una fuerza a una frecuencia dada y no tenemos ninguna fuente de ruido más, el mínimo cambio en amplitud que podemos detectar será precisamente la amplitud de oscilación del ruido termomecánico. De forma análoga, si detectamos cambios en frecuencia, el mínimo cambio detectable será el producido por las oscilaciones en frecuencia debidas al ruido termomecánico.

A partir de la ecuación (1.59), obtenemos la amplitud de oscilación por ruido termomecánico a la frecuencia de resonancia del oscilador

$$\langle w^2 \rangle^{1/2} = \frac{2}{\omega_n} \sqrt{\frac{BQ_n}{\omega_n M_n}} K_B T = \frac{2}{\omega_n} \sqrt{\frac{BK_B T}{\gamma_n}} \quad (1.60)$$

Además, se puede demostrar[28] que este ruido en la amplitud, producirá un ruido en la determinación de la frecuencia que será

$$\delta\omega_0 = \left[\frac{K_B T}{E_c} \frac{\omega_n B}{Q_n} \right]^{1/2} \quad (1.61)$$

donde $E_c = \frac{Q_n^2 F_0^2}{\omega_n^2 m_n}$, es la energía cinética máxima por ciclo de oscilación. A partir de estas cantidades se determinará el límite de detección de nuestros resonadores, tanto para medidas del cambio en frecuencia así como del cambio en amplitud.

1.5.3. Límite termomecánico de detección en masa

Llamaremos límite termomecánico de detección a la mínima masa detectable por nuestro sensor, despreciando todas las fuentes de ruido excepto el ruido termomecánico. A partir de las ecuaciones (1.53) y (1.61), tenemos que, para medidas de cambios en frecuencia, la mínima masa detectable se expresa como

$$\delta M_{min} = m_n \sqrt{4 \frac{E_{th}}{E_c} \frac{B}{\omega_n Q_n}} \quad (1.62)$$

Donde $E_{th} = K_B T$. Por lo que cuanto menor sea la masa del oscilador y mayor sea su factor de calidad y frecuencia, menor será la mínima masa detectable por nuestro sensor. En el capítulo 4 haremos un tratamiento análogo para el caso de medidas de cambios en amplitud, aplicándolo a resonadores acoplados y comprobaremos si estos pueden superar a los resonadores individuales desde este punto de vista.

REFERENCIAS

1. Landau, L., Lifshitz, E. "Teoría de la elasticidad" Ed. Reverte, (1982).
2. Timoshenko, S., Soodier, J.N. "Teoría de la elasticidad" Ed. Urmo, (1975).
3. Einstein, A. "The Foundation of the General Theory of Relativity " Annalen Phys., (1916).
4. Bokaian, A. "Natural Frequencies of beams under compressive axial loads" Journal of Sound and Vibration, **126**, 1 (1988).
5. Salapaka, M.V., Bergh, H.S., Lai, J., Majumdar, A., McFarland, E. "Multi-mode noise analysis of cantilevers for scanning probe microscopy" Journal of Applied Physics, **81**, 6 (1997).
6. Rast, S., Wattinger, C., Gysin, U., Meyer, E. "Dynamics of damped cantilevers" Review of Scientific Instruments, **71**, 7 (2000).
7. Stark, R.W., Heckl, W.M. "Fourier transformed atomic force microscopy: tapping mode atomic force microscopy beyond the Hookian approximation" Surface Science, **457**, 1-2 (2000).
8. Yasumura, K.Y., Stowe, T.D., Chow, E.M., Pfafman, T., Kenny, T.W., Stipe, B.C., Rugar, D. "Quality factors in micron- and submicron-thick cantilevers" Journal of Microelectromechanical Systems, **9**, 1 (2000).
9. Sader, J.E. "Frequency response of cantilever beams immersed in viscous fluids with applications to the atomic force microscope" Journal of Applied Physics, **84**, 1 (1998).
10. Dorignac, J., Kalinowski, A., Erramilli, S., Mohanty, P. "Dynamical response of nanomechanical oscillators in immiscible viscous fluid for in vitro biomolecular recognition" Physical Review Letters, **96**, 18 (2006).
11. Ghatkesar, M.K., Braun, T., Barwich, V., Ramseyer, J.-P., Gerber, C., Hegner, M., Lang, H.P. "Resonating modes of vibrating microcantilevers in liquid" Applied Physics Letters, **92**, 4 (2008).
12. Yum, K., Wang, Z.Y., Suryavanshi, A.P., Yu, M.F. "Experimental measurement and model analysis of damping effect in nanoscale mechanical beam resonators in air" Journal of Applied Physics, **96**, 7 (2004).
13. Tung, R.C., Jana, A., Raman, A. "Hydrodynamic loading of microcantilevers oscillating near rigid walls" Journal of Applied Physics, **104**, 11 (2008).
14. Bao, M., Yang, H. "Squeeze film air damping in MEMS" Sensors and Actuators a-Physical, **136**, 1 (2007).
15. Hosaka, H., Itao, K., Kuroda, S. "Damping characteristics of beam-shaped micro-oscillators" Sensors and Actuators a-Physical, **49**, 1-2 (1995).
16. Tunvir, K., Ru, C.Q., Mioduchowski, A. "Thermoelastic dissipation of hollow micromechanical resonators" Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures, **42**, 9 (2010).
17. Basak, S., Raman, A., Garimella, S.V. "Hydrodynamic loading of microcantilevers vibrating in viscous fluids" Journal of Applied Physics, **99**, 11 (2006).

18. Paolino, P., Bellon, L. "*Frequency dependence of viscous and viscoelastic dissipation in coated micro-cantilevers from noise measurement*" Nanotechnology, **20**, 40 (2009).
19. Tamayo, J. "*Study of the noise of micromechanical oscillators under quality factor enhancement via driving force control*" Journal of Applied Physics, **97**, 4 (2005).
20. Dohn, S., Schmid, S., Amiot, F., Boisen, A. "*Position and mass determination of multiple particles using cantilever based mass sensors*" Applied Physics Letters, **97**, 4 (2010).
21. Ramos, D., Calleja, M., Mertens, J., Zaballos, A., Tamayo, J. "*Measurement of the mass and rigidity of adsorbates on a microcantilever sensor*" Sensors, **7**, 9 (2007).
22. Tamayo, J., Ramos, D., Mertens, J., Calleja, M. "*Effect of the adsorbate stiffness on the resonance response of microcantilever sensors*" Applied Physics Letters, **89**, 22 (2006).
23. Ramos, D., Tamayo, J., Mertens, J., Calleja, M., Villanueva, L.G., Zaballos, A. "*Detection of bacteria based on the thermomechanical noise of a nanomechanical resonator: origin of the response and detection limits*" Nanotechnology, **19**, 3 (2008).
24. Ramos, D., Tamayo, J., Mertens, J., Calleja, M., Zaballos, A. "*Origin of the response of nanomechanical resonators to bacteria adsorption*" Journal of Applied Physics, **100**, 10 (2006).
25. Ramos, D., Arroyo-Hernandez, M., Gil-Santos, E., Tong, H.D., Van Rijn, C., Calleja, M., Tamayo, J. "*Arrays of Dual Nanomechanical Resonators for Selective Biological Detection*" Analytical Chemistry, **81**, 6 (2009).
26. Waggoner, P.S., Craighead, H.G. "*The relationship between material properties, device design, and the sensitivity of resonant mechanical sensors*" Journal of Applied Physics, **105**, 5 (2009).
27. Yi, J.W., Shih, W.Y., Shih, W.H. "*Effect of length, width, and mode on the mass detection sensitivity of piezoelectric unimorph cantilevers*" Journal of Applied Physics, **91**, 3 (2002).
28. Ekinici, K.L., Yang, Y.T., Roukes, M.L. "*Ultimate limits to inertial mass sensing based upon nanoelectromechanical systems*" Journal of Applied Physics, **95**, 5 (2004).
29. Butt, H.J., Jaschke, M. "*Calculation of thermal noise in atomic-force microscopy*" Nanotechnology, **6**, 1 (1995).
30. Saulson, P.R. "*Thermal noise in mechanical experiments*" Physical Review D, **42**, 8 (1990).
31. deGroot, S.R., Mazur, P. "*Non-equilibrium thermodynamics*" Dover: New York, **Chapter 8.4**, (1984).
32. Cleland, A.N., Roukes, M.L. "*Noise processes in nanomechanical resonators*" Journal of Applied Physics, **92**, 5 (2002).

Capítulo 2

Sistema experimental

En este capítulo se muestran las distintas técnicas que se utilizan para la caracterización de resonadores nanomecánicos, donde describiremos tanto los métodos de transducción, como los métodos de excitación, que en ocasiones son necesarios para aumentar la amplitud de vibración. Tras comentar las ventajas y desventajas que estos presentan, describiremos nuestro sistema de caracterización. Se trata de un sistema de interferometría óptica diseñado para la caracterización del ruido termomecánico de nuestros resonadores en alto vacío y temperatura ambiente, permitiendo también analizar la respuesta ante excitaciones mecanoacústicas o fototérmicas.

Por último, se describirá técnica utilizada para la calibración de la respuesta de nuestros sensores ante la adsorción de partículas, la deposición de carbono por haz de electrones. Mostraremos que la metodología propuesta permite controlar de forma muy sencilla tanto la región donde se deposita, con precisión nanométrica, como la cantidad de masa depositada, siendo esta del orden de femtogramos por minuto.

2.1. TRANSDUCCIÓN Y EXCITACIÓN DE SISTEMAS NANOMECÁNICOS

Con el continuo avance de la miniaturización de los resonadores nanomecánicos, uno de los grandes retos en el campo es el desarrollo de sistemas de transducción que permitan medir el movimiento de los resonadores con precisión superior a $\text{pm/Hz}^{1/2}$. Los métodos utilizados se pueden dividir en dos grandes grupos: ópticos y eléctricos [1, 2]. Ambos tipos tienen una sensibilidad muy alta al movimiento, aunque en ocasiones, se tienen que usar métodos de excitación que favorecen el movimiento de las palancas para facilitar o mejorar su detección. A continuación se describen brevemente los principales métodos de transducción y excitación comentando sus principales ventajas e inconvenientes.

2.1.1. Métodos de transducción ópticos

Los métodos ópticos destacan entre los métodos de detección por su alta sensibilidad, lo que permite la medida del ruido termomecánico con gran resolución. Otras ventajas fundamentales son su fácil implementación y la posibilidad de aplicarse en líquidos siempre que el medio no disperse o absorba la luz, además de ser métodos poco invasivos. La principal desventaja es que las dimensiones de los elementos utilizados para la detección son mucho mayores que los resonadores, lo que limita la portabilidad del sistema. Este problema se intenta solventar mediante la fabricación de guías de onda resonadoras, las cuales permiten la integración de la transducción en el mismo dispositivo. Otra de las desventajas que parecían presentar estos métodos era su aplicación a nanoresonadores con dimensiones menores a la longitud de onda, como nanohilos o nanotubos, ya que los efectos dispersivos y la baja reflectividad limitarían su capacidad de detección. Sin embargo, en los últimos años, ya son varios los trabajos en los que se ha logrado extender este tipo de detección a nanoresonadores [3, 4].

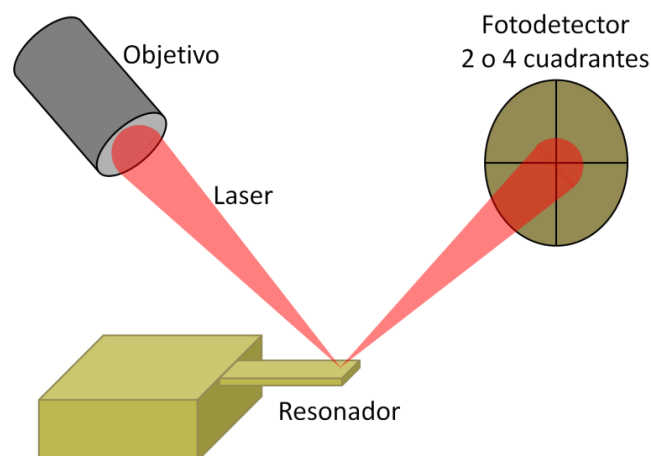


Figura 2.1 Esquema del método de deflexión de haz.

Entre los métodos ópticos, el más utilizado, por ser uno de los más sensibles y baratos, es el método de deflexión de haz [5, 6] (Figura 2.1). La técnica consiste en enfocar un laser sobre el extremo libre de la palanca, y recoger su reflejo sobre un fotodiodo segmentado o un detector sensible a la posición (PSD). El fotodiodo convierte la energía luminosa de cada segmento en una señal eléctrica, al doblarse la palanca la cantidad de luz que llega a cada segmento cambia y por lo que tendremos una señal eléctrica. Los láseres utilizados suelen ser láseres de diodo y los fotodetectores pueden estar divididos en 2 o en 4 cuadrantes, siendo estos últimos, capaces de medir al mismo tiempo tanto modos flexurales, como laterales y torsionales. También es posible medir con fotodetectores no segmentados, simplemente localizando el haz sobre uno de sus bordes[7]. Con este método tan sencillo, se han logrado medir desplazamientos del orden de Angstroms. Además, mediante la utilización de escáneres o espejos motorizados se ha logrado implementar este método para la medida de matrices de palancas de forma simultánea[8], incluso aportando información sobre la topografía de estas y la forma de los modos de oscilación [9].

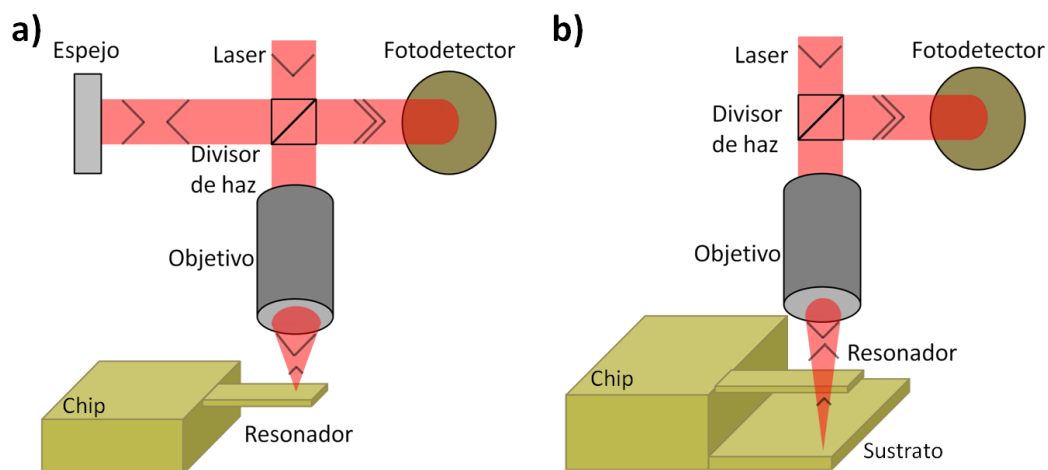


Figura 2.2 Esquema de los métodos interferométricos: (a) Michelson (b) Fabry-Perot.

Otro tipo de sistemas ópticos son los sistemas interferométricos, entre los que destacan el interferómetro Michelson y el Fabri-Perot [10-12] (Figura 2.2). En el caso de la interferometría Michelson un haz laser se divide en dos, uno de ellos se dirige a un espejo estable, el otro se enfoca en la punta del resonador y sus reflejos interfieren sobre el fotodetector. El movimiento del resonador cambia la fase entre ambos haces, variando el patrón de interferencia producido y por tanto, la intensidad recogida en el fotodetector. Para maximizar la sensibilidad, ambos haces deben de tener una intensidad similar y una fase cercana a $(2n + 1)\lambda/4$, siendo n un número entero. En la configuración Fabry-Perot se forma una cavidad óptica entre el sustrato y el resonador, la longitud de la cavidad cambia cuando este vibra y por tanto su reflectividad, lo que modifica la intensidad recogida sobre el

fotodetector. Estos métodos son más sensibles que el método de deflexión de haz, pudiendo medir desplazamientos inferiores a picómetros. Por otro lado, necesitan una gran estabilidad y la utilización de láseres de luz coherente lo que hace que sean sistemas más complejos, grandes y caros. Nótese, que en ambos casos, solo son detectados los movimientos sobre el eje óptico, en la dirección de propagación del haz, y en ningún caso aquellos ortogonales a este.

2.1.2. Métodos de transducción eléctricos

Entre los principales métodos de transducción eléctricos se encuentran los sistemas piezoeléctricos, los piezorresistivos, los capacitivos y los de efecto túnel entre otros[13]. Los sistemas piezoeléctricos utilizan palancas fabricadas con materiales que presentan piezoelectricidad, es decir, que adquieren una diferencia de potencial en su superficie cuando son sometidos a tensiones mecánicas[14]. Por tanto, el movimiento de la palanca producirá variaciones medibles de voltaje. El efecto contrario también sucede, es decir, aplicando un voltaje se produce una deformación, por lo que este tipo de materiales también serán usados en la excitación de nuestros dispositivos. Los materiales más utilizados son el cuarzo o el óxido de zinc, así como determinadas cerámicas y polímeros. Los sistemas piezorresistivos también se basan en la detección de la deformación. En este caso las palancas se fabrican con materiales que presentan piezorresistencia, es decir, que cambian su conductividad eléctrica cuando se deforman[15]. La deformación y el cambio relativo de resistencia pueden relacionarse linealmente a través del factor de Gauge, por lo que se eligen materiales que maximicen este parámetro. Este efecto está presente en metales, debido a la variación de la distancia interatómica, y en semiconductores, por la modificación del número de portadores. Entre ellos, los más utilizados son el silicio y el polisilicio dopados. Además, recientemente se ha observado que precisamente los nanohilos de silicio presentan un factor de Gauge extremadamente alto[16], fenómeno conocido como piezorresistencia gigante, lo que hace especialmente interesante su aplicación con este tipo de detección.

La lectura capacitiva mide la capacidad de un condensador formado por un conductor depositado sobre la palanca y otro conductor fijo en el sustrato, ambos muy cercanos[17]. El movimiento de la palanca modifica la distancia de ambos conductores y por tanto su capacidad. La ventaja de este método sobre los anteriores métodos eléctricos, es su compatibilidad con la tecnología CMOS estándar. Como desventaja, todos estos métodos eléctricos poseen una sensibilidad menor que los métodos ópticos, con lo que normalmente, no son capaces de medir el ruido termomecánico y tienen que utilizarse acompañados por algún método de actuación. Además, requieren de la conexión de contactos eléctricos a las palancas, lo que dificulta su fabricación, así como su aplicación en medios líquidos. Por otro lado, la utilización de corrientes produce disipación de energía, lo que puede crear derivas térmicas que limiten la sensibilidad de nuestros sensores. Como principal ventaja, todos ellos presentan la posibilidad de hacer circuitos integrados, con el sistema de actuación y el de medida en el mismo chip, y aplicarse a matrices de

resonadores, lo que reduciría de forma considerable tanto el tamaño como el coste total de los dispositivos.

Otro método de medida eléctrico es la lectura por efecto túnel[18]. Consiste en situar una punta conductora a una distancia subnanométrica de la palanca y mediante la aplicación de un voltaje, medir la corriente túnel. Es el más sensible de todos los métodos de detección, habiéndose probado sensibilidades superiores a 0.1 pm, pero su implementación no es sencilla y además, su respuesta no es lineal y posee un rango dinámico limitado.

2.1.3. Métodos de excitación

En la mayoría de las medidas que presentamos en este trabajo, el movimiento detectado será únicamente el debido al ruido termomecánico. Como vimos, al deberse a fuerzas sin coherencia espacial ni temporal, las medidas del ruido termomecánico proporcionan una medida natural tanto de las frecuencias como de la forma de los modos de vibración. Por contra, la amplitud de vibración por ruido termomecánico suele ser subnanométrica, lo que complica en gran medida su detección. Es por ello que la mayoría de los sistemas de detección de resonadores utilizan fuerzas externas que aumentan el movimiento de estos[19].

Entre los métodos de excitación, cabe destacar la excitación mecano-acústica o piezoeléctrica, una de las más utilizadas en el campo por su fácil implementación y que utilizaremos nosotros durante el capítulo 4. Consiste en adherir una lámina de material piezoeléctrico a nuestro chip y aplicar un voltaje en los extremos provocando su dilatación o contracción y por tanto actuando el movimiento de nuestra palanca. El principal problema que presenta esta técnica es la excitación de resonancias espurias provenientes del chip, o en el caso de medidas en líquidos, provenientes de la celda o incluso del propio fluido[20]. La aparición de un “bosque de picos”, debido a estas resonancias, dificulta la determinación de la resonancia propia de la palanca y por tanto, su aplicación como sensor.

En los últimos años, se han desarrollado diferentes métodos de excitación, basados en la aplicación de fuerzas locales sobre los resonadores para evitar este efecto. Entre estos métodos se encuentran diferentes métodos eléctricos como son la excitación electroestática, magnética, piezoeléctrica local o térmica por efecto Joule. Todos estos métodos necesitan de contactos eléctricos que dificultan su proceso de fabricación. Por otro lado, la excitación magnetostrictiva [21] o la utilización de métodos ópticos, como la excitación fototérmica [22] o por fuerzas ópticas [23], simplifican la fabricación de los dispositivos y su aplicación en medios líquidos. Además, los métodos ópticos permiten, en cierta medida, seleccionar el modo que se quiere excitar, ya que se puede elegir donde aplicar la fuerza. Otra de las características importantes de los métodos de excitación es la frecuencia que pueden alcanzar. En este aspecto también cabe destacar los métodos de excitación ópticos, en especial la excitación por fuerzas ópticas, ya que estos no poseen ninguna limitación intrínseca, excepto la frecuencia de la luz y por tanto son los métodos que pueden alcanzar una mayor velocidad.

2.2. SISTEMA EXPERIMENTAL

El sistema experimental montado durante esta tesis, se trata de un sistema de interferometría óptica, en configuración Michelson para la medida de resonadores acoplados y Fabry-Perot para nanohilos. Está diseñado para medir el ruido termomecánico en alto vacío, aunque también permite caracterizar la respuesta de nuestros resonadores ante excitaciones mecanoacústicas o fototérmicas. Se ha elegido un sistema interferométrico por ser uno de los métodos más sensible, lo que nos permite medir las oscilaciones debidas al ruido termomecánico con mucha resolución.

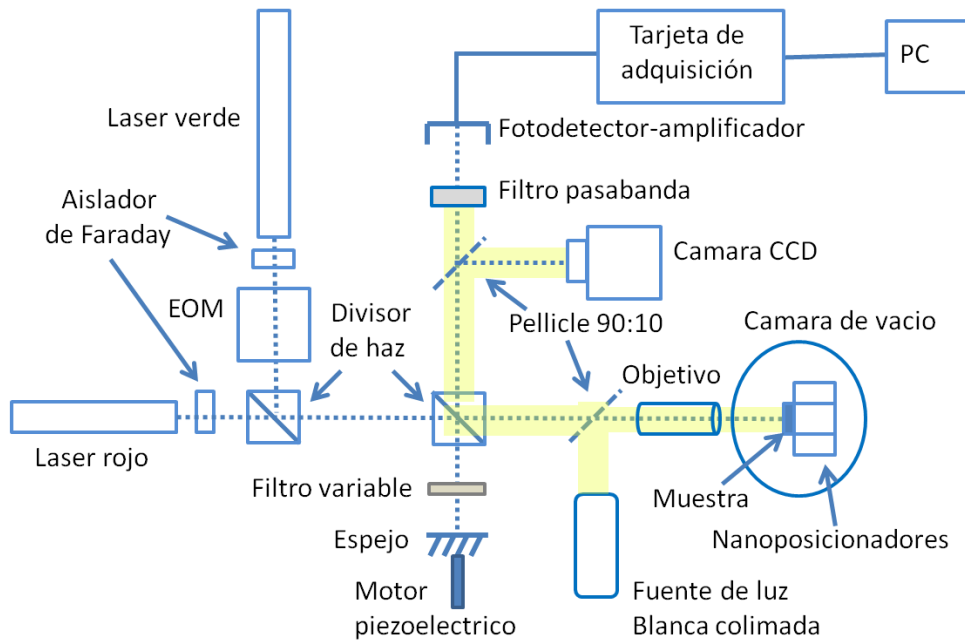


Figura 2.3. Esquema del sistema de interferometría óptica montado durante la presente tesis.

La figura 2.3 muestra un esquema del sistema de caracterización. Básicamente, consta de un laser He-Ne (632 nm, 5 mW, Newport Corp.), un divisor de haz que dirige uno de los haces sobre un espejo y el otro sobre un objetivo que enfoca este sobre nuestro resonador, y un fotodetector que recoge la interferencia producida por ambos reflejos. El espejo está controlado por un microposicionador motorizado (Newport Corp.) que nos permite situarnos en las zonas de interferencia más sensibles, donde la fase ente ambos haces es cercana a $(2n + 1)\pi/4$. Además, un filtro variable nos permite ajustar la intensidad reflejada por el espejo para igualarla a la proveniente del resonador. La muestra se encuentra dentro de una cámara de vacío, de diseño y fabricación casera, capaz de alcanzar presiones por debajo de 10^{-7} mbar. Para ello se utiliza una bomba rotatoria (DS-42, Varian Inc.) y una bomba turbomolecular (V-81M, Varian Inc.). Dentro de la cámara, un sistema de nanoposicionadores (ANPxyz-101, Attocube Systems AG)

permite mover la muestra con precisión de decenas de nanómetros. Además, bajo la muestra se encuentra una lámina piezoeléctrica que nos permitirá medir la respuesta de nuestros sensores ante una excitación mecanoacústica. También cuenta con un segundo laser (543 nm, 3 mW, Thorlabs Inc.) que nos permite cambiar la longitud de onda utilizada en nuestra medida. Además, mediante la incorporación de un modulador electro-óptico (350-105, ConOptics Inc.), capaz de modular la luz hasta 20 MHz, uno de los láseres puede usarse como una fuente de excitación óptica.

Para reducir el ruido, se han usado aisladores de Faraday (Newport Corp.) que evitan que el haz regrese a las cavidades de los láseres, lo que desestabilizaría su potencia. Además, los fotodetectores utilizados son fotodetectores-amplificadores, lo que reduce de forma considerable el ruido eléctrico, al amplificar la señal justo en el fotodetector. Dependiendo de la frecuencia de resonancia de nuestros dispositivos hemos utilizado 2 tipos de fotodetectores (PDA36A o PDA10A, Thorlabs Inc.).

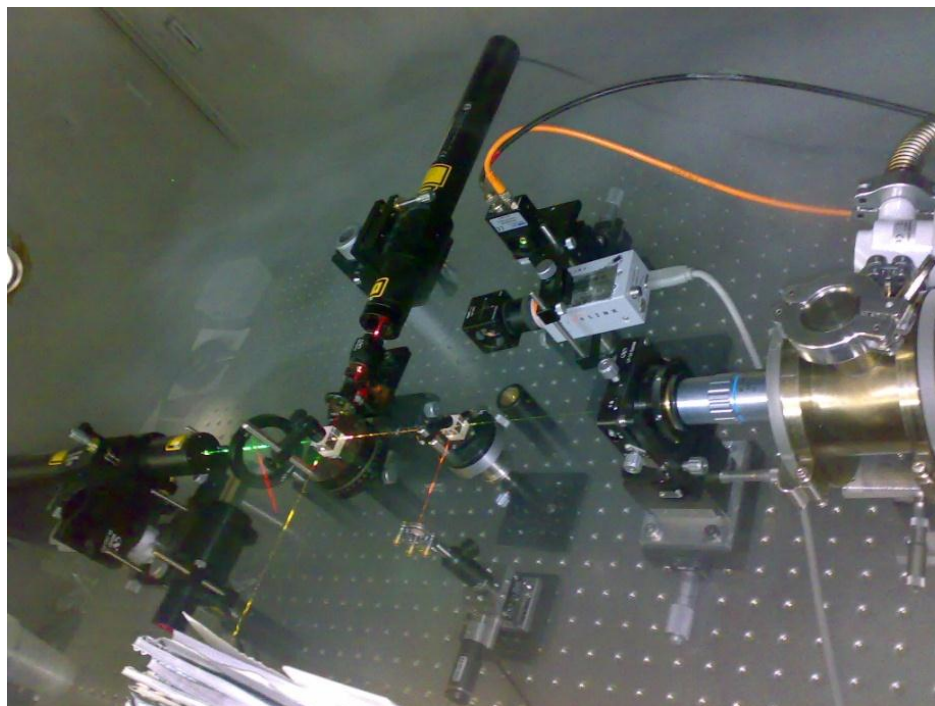


Figura 2.4. Foto del sistema de interferometría óptica en una de sus configuraciones.

Se han utilizado objetivos ópticos Mitutoyo con larga distancia de trabajo para permitir salvar la distancia entre el objetivo y la muestra, debida al cristal de la campana. Dependiendo de la muestra se han utilizado diferentes magnificaciones (10x, NA 0.28; 20x, NA 0.42; 50x, NA 0.55), obteniendo en el mejor de los casos un tamaño de spot de $2\ \mu\text{m}$. Para visualizar la muestra y la posición del laser sobre ella, se ha incluido una cámara CCD, junto con una fuente de luz blanca colimada.

Además de todos los elementos mencionados anteriormente, el sistema cuenta con filtros pasabanda, filtros de atenuación variables, polarizadores, retardadores de fase y divisores de haz, que han sido utilizados dependiendo de la medida concreta a realizar. La figura 2.4 muestra una foto del sistema experimental en una de las configuraciones habituales. Finalmente, la señal procedente del fotodetector es procesada a través de una tarjeta de adquisición (PCI-5124, National Instruments Corp.).

La figura 2.5 muestra el espectro de ruido termomecánico en alto vacío de una palanca aislada junto con su respuesta ante fuerzas externas, en este caso de tipo mecanoacústico. A partir de la ecuación (1.60) y las dimensiones de nuestro resonador podemos calcular la amplitud de oscilación por ruido termomecánico a la frecuencia de resonancia, lo que nos sirve para calibrar nuestro sistema. Para este dispositivo, nuestra sensibilidad al movimiento es de $0.1 \text{ pm}/(\mu\text{W}\cdot\text{Hz}^{-1/2})$ y el límite de detección debido al ruido eléctrico de $2,5 \text{ pm}/\text{Hz}^{-1/2}$. La sensibilidad al movimiento de nuestro sistema depende mucho del dispositivo estudiado, por ejemplo, debido a variaciones en su reflectividad. Es por este motivo que la calibración del sistema se debería hacer para cada dispositivo y por eso la mayoría de las medidas mostradas a lo largo del presente trabajo considerarán la amplitud de oscilación con unidades arbitrarias.

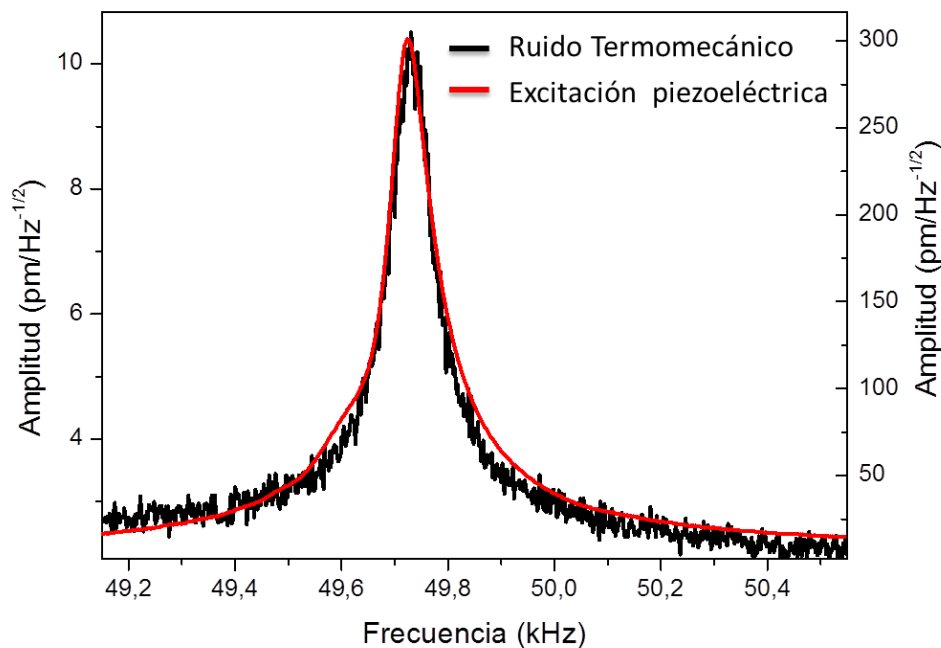


Figura 2.5. Comparación del espectro de ruido termomecánico y la respuesta forzada mediante excitación mecanoacústica para una palanca de nitruro de silicio de $50 \times 15 \times 0,1 \mu\text{m}^3$.

2.3. DEPOSICIÓN DE CARBONO POR HAZ DE ELECTRONES

Para caracterizar la respuesta de nuestros resonadores ante la deposición de átomos y moléculas, hemos utilizado la deposición de carbono por haz de electrones[24-26]. Esta técnica nos permite, de forma sencilla, controlar tanto la posición como la cantidad de masa depositada sobre nuestros resonadores, con una precisión de decenas de nanómetros y cientos de attogramos, respectivamente.

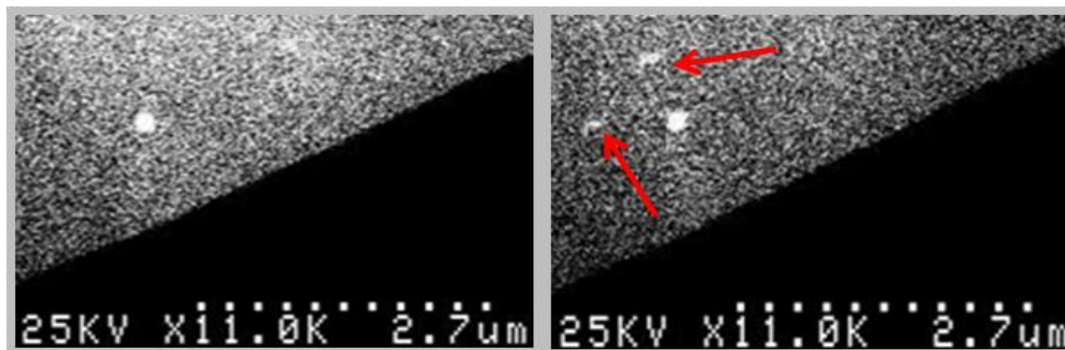


Figura 2.6. Imágenes de SEM del extremo libre de una palanca, antes y después de enfocar el haz de electrones durante 30 minutos en dos zonas diferentes.

La técnica consiste en focalizar el haz de electrones de un microscopio electrónico de barrido (SEM) sobre la zona deseada de nuestra muestra. En la presencia de un gas residual, incluso cuando la presión es de 10^{-10} mbar, es conocido que un haz de electrones focalizado produce la deposición de material sobre la zona irradiada. El material depositado se trata de carbono amorfo proveniente de la disociación de las especies orgánicas presentes en la campana. El ritmo de crecimiento dependerá de cada SEM, debido a que la composición de los gases residuales así como la presión no son las mismas. Además, dependerá de la energía del haz utilizado y de la corriente del haz. En nuestro caso hemos utilizado un SEM Hitachy de emisión de campo con una energía de haz de 25 keV y una corriente de 50 pA. La figura 2.6 muestra una imagen de SEM del extremo libre de una palanca antes y después de depositar carbono sobre ella. Se puede observar el gran control sobre el posicionamiento de los puntos de contaminación formando un triángulo equilátero de $1\ \mu\text{m}$ de lado. La precisión en la localización de los puntos está limitada tanto por la resolución del SEM, en torno a los 10 nm, como por los movimientos mecánicos de la muestra. En cada deposición se ha enfocado el haz de electrones durante 30 minutos, produciendo líneas de 40 nm de anchura y 100 nm de longitud. Por tanto, cuando el tiempo de deposición sea corto, menor de 5 minutos, la precisión en la localización de los puntos puede alcanzar los 20 nm. En cambio, si el tiempo excede los 5 minutos, la incertidumbre en la localización de la masa aumenta, hasta alcanzar los cientos de nanómetros a la media hora. En este sentido tendremos que tener cuidado en su aplicación a nanohilos, ya que estos tienen un diámetro de cientos de nanómetros. Además, como la caracterización de los resonadores y la deposición no se realizan en la misma campana, es necesario

fabricar un portamuestras compatible con ambos sistemas para minimizar las variaciones en la frecuencia de resonancia que pueden sufrir nuestros resonadores durante su manipulación.

Para calibrar esta técnica utilizamos un chip de palancas individuales de $25\ \mu\text{m}$ de longitud, $10\ \mu\text{m}$ de anchura y $100\ \text{nm}$ de espesor, iguales a los resonadores acoplados que se utilizarán en los próximos dos capítulos. Una vez caracterizado su estado inicial, se introducen en el SEM y se focaliza el haz de electrones sobre la punta de cada una de ellas durante 5 minutos. En la figura 2.7 se representan los cambios relativos en frecuencia en función del tiempo que llevaba la muestra en la campana. A medida que pasa el tiempo se observa una disminución de la velocidad de deposición hasta que se alcanza un estado estacionario después de 30-40 minutos. Esto se atribuye al incremento de contaminación residual que se produce cuando introducimos la muestra, por lo que se necesita un tiempo para que la presión alcance su estado estacionario. A través de la variación de la frecuencia obtenemos la masa depositada en las palancas utilizando la ecuación (1.46), obteniendo que en el estado estacionario se deposita $(6,8 \pm 0,7)\ \text{fg/min}$ en palancas de nitruro de silicio de $100\ \text{nm}$ de espesor.

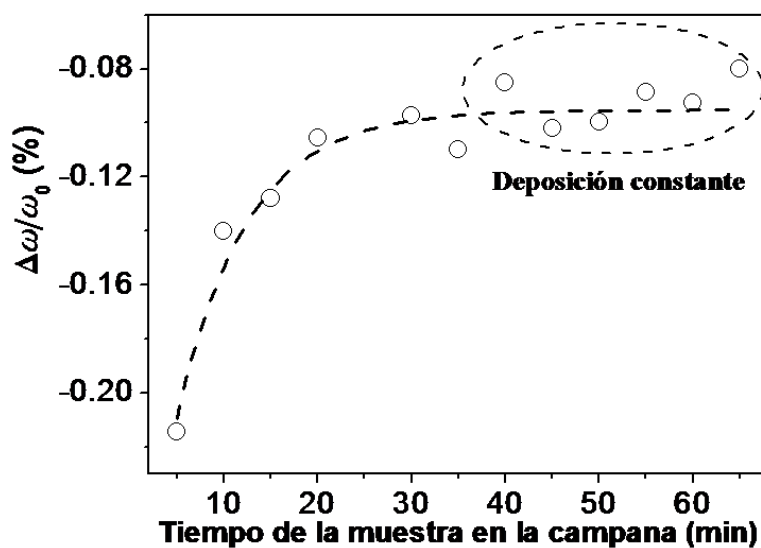


Figura 2.7. Calibración de la deposición de carbono por haz de electrones. Cambio relativo en frecuencia para deposiciones de 5 minutos, en la punta de micropalancas de nitruro de silicio, en función del tiempo de la muestra en la campana del SEM. Después de 40 minutos se alcanza el estado estacionario, en el cual el ritmo de deposición es de $6.8\ \text{fg/min}$.

Esta calibración nos será muy útil cuando depositemos carbono sobre los resonadores acoplados, pero en el caso de los nanohilos el ritmo de deposición no tiene por qué ser el mismo al tratarse de otro material y tener distinto espesor. Lo que sí será aplicable es que debemos esperar 40 minutos si queremos que el ritmo de deposición siempre sea el mismo, por lo que a partir de ahora, toda deposición se realizará una vez pasado este tiempo.

REFERENCIAS

1. Goeders, K.M., Colton, J.S., Bottomley, L.A. "*Microcantilevers: sensing chemical interactions via mechanical motion*" Chem Rev, **108**, 2 (2008).
2. Craighead, H.G. "*Nanoelectromechanical systems*" Science, **290**, 5496 (2000).
3. Karabacak, D., Kouh, T., Ekinici, K.L. "*Analysis of optical interferometric displacement detection in nanoelectromechanical systems*" Journal of Applied Physics, **98**, 12 (2005).
4. Sanii, B., Ashby, P.D. "*High Sensitivity Deflection Detection of Nanowires*" Physical Review Letters, **104**, 14 (2010).
5. Meyer, G., Amer, N.M. "*Novel optical approach to atomic force microscopy*" Applied Physics Letters, **53**, 12 (1988).
6. Meyer, G., Amer, N.M. "*Simultaneous measurement of lateral and normal forces with an optical-beam-deflection atomic force microscope*" Applied Physics Letters, **57**, 20 (1990).
7. Karabacak, D., Kouh, T., Huang, C.C., Ekinici, K.L. "*Optical knife-edge technique for nanomechanical displacement detection*" Applied Physics Letters, **88**, 19 (2006).
8. Álvarez, M., Tamayo, J. "*Optical sequential readout of microcantilever arrays for biological detection*" Sensors and Actuators B: Chemical, **106**, 2 (2005).
9. Kosaka, P.M., Tamayo, J., Gil-Santos, E., Mertens, J., Pini, V., Martínez, N.F. "*Simultaneous imaging of the topography and dynamic properties of nanomechanical systems by optical beam deflection microscopy*", (2011).
10. Belov, M., Quitoriano, N.J., Sharma, S., Hiebert, W.K., Kamins, T.I., Evoy, S. "*Mechanical resonance of clamped silicon nanowires measured by optical interferometry*" Journal of Applied Physics, **103**, 7 (2008).
11. Azak, N.O., Shagam, M.Y., Karabacak, D.M., Ekinici, K.L., Kim, D.H., Jang, D.Y. "*Nanomechanical displacement detection using fiber-optic interferometry*" Applied Physics Letters, **91**, 9 (2007).
12. Kouh, T., Karabacak, D., Kim, D.H., Ekinici, K.L. "*Diffraction effects in optical interferometric displacement detection in nanoelectromechanical systems*" Applied Physics Letters, **86**, 1 (2005).
13. Ekinici, K.L. "*Electromechanical transducers at the nanoscale: Actuation and sensing of motion in nanoelectromechanical systems (NEMS)*" Small, **1**, 8-9 (2005).
14. Itoh, T., Lee, C., Suga, T. "*Deflection detection and feedback actuation using a self-excited piezoelectric Pb(Zr,Ti)O-3 microcantilever for dynamic scanning force microscopy*" Applied Physics Letters, **69**, 14 (1996).
15. Mile, E., Jourdan, G., Bargatin, I., Labarthe, S., Marcoux, C., Andreucci, P., Hentz, S., Kharrat, C., Colinet, E., Duraffourg, L. "*In-plane nanoelectromechanical resonators based on silicon nanowire piezoresistive detection*" Nanotechnology, **21**, 16 (2010).
16. Fernandez-Regulez, M., Plaza, J.A., Lora-Tamayo, E., San Paulo, A. "*Lithography guided horizontal growth of silicon nanowires for the fabrication*"

- of ultrasensitive piezoresistive strain gauges*" Microelectronic Engineering, **87**, 5-8 (2010).
17. Britton, C.L., Jones, R.L., Oden, P.I., Hu, Z., Warmack, R.J., Smith, S.F., Bryan, W.L., Rochelle, J.M. "*Multiple-input microcantilever sensors*" Ultramicroscopy, **82**, 1-4 (2000).
 18. Thundat, T., Warmack, R.J., Chen, G.Y., Allison, D.P. "*Thermal and ambient-induced deflections of scanning force microscope cantilevers*" Applied Physics Letters, **64**, 21 (1994).
 19. Waggoner, P.S., Craighead, H.G. "*Micro- and nanomechanical sensors for environmental, chemical, and biological detection*" Lab on a Chip, **7**, 10 (2007).
 20. Asakawa, H., Fukuma, T. "*Spurious-free cantilever excitation in liquid by piezoactuator with flexure drive mechanism*" Review of Scientific Instruments, **80**, 10 (2009).
 21. Penedo, M., Fernandez-Martinez, I., Costa-Kraemer, J.L., Luna, M., Briones, F. "*Magnetostriction-driven cantilevers for dynamic atomic force microscopy*" Applied Physics Letters, **95**, 14 (2009).
 22. Ramos, D., Tamayo, J., Mertens, J., Calleja, M. "*Photothermal excitation of microcantilevers in liquids*" Journal of Applied Physics, **99**, 12 (2006).
 23. Zalalutdinov, M., Olkhovets, A., Zehnder, A., Ilic, B., Czaplewski, D., Craighead, H.G., Parpia, J.M. "*Optically pumped parametric amplification for micromechanical oscillators*" Applied Physics Letters, **78**, 20 (2001).
 24. Vladar, A.E., Postek, M.T., Vane, R., *Active monitoring and control of electron beam induced contamination*, in *Metrology, Inspection, and Process Control for Microlithography Xv*, N.T. Sullivan, Editor 2001. p. 835-843.
 25. Wei, X.L., Liu, Y., Chen, Q., Peng, L.M. "*Controlling electron-beam-induced carbon deposition on carbon nanotubes by Joule heating*" Nanotechnology, **19**, 35 (2008).
 26. Isabell, T.C., Fischione, P.E., O'Keefe, C., Guruz, M.U., Dravid, V.P. "*Plasma cleaning and its applications for electron microscopy*" Microscopy and Microanalysis, **5**, 2 (1999).

Capítulo 3

Desarrollo de sensores nanomecánicos acoplados

Los próximos dos capítulos tratarán el estudio de los resonadores nanomecánicos acoplados como sensores de masa. Tras hacer una breve introducción a los resonadores acoplados y sus diferentes aplicaciones, mostraremos nuestros dispositivos, su proceso de fabricación y caracterización. A continuación se mostrará la teoría de osciladores armónicos acoplados, a partir de la cual presentaremos los modos colectivos de vibración y el fenómeno que hace tan atractivo a estos sistemas en su aplicación como sensores de masa, la localización de los modos. En este punto, se explicarán las ventajas que presentan estos dispositivos frente a los resonadores individuales. Entre ellas destaca el aumento de la sensibilidad en medidas de localización cuando el acoplamiento decrece, cuya demostración será el objetivo principal de este capítulo.

Para ello, analizaremos la dependencia de la constante de acoplamiento mecánico con las dimensiones de la membrana que unen las palancas, tanto experimentalmente como con simulaciones por elementos finitos. Finalmente, utilizaremos la técnica de deposición de carbono por haz de electrones, para caracterizar el efecto que produce la adsorción de masa en la localización de los modos y demostraremos que la sensibilidad es inversamente proporcional al acoplamiento.

3.1. INTRODUCCIÓN

El comportamiento colectivo de los sistemas de resonadores nanomecánicos acoplados puede mejorar en gran medida las prestaciones de los dispositivos basados en resonadores individuales en muchas de sus aplicaciones. Por ejemplo, en su aplicación como filtros de radio frecuencia, los resonadores acoplados son capaces de modificar de forma sencilla no solo la frecuencia central sino también el ancho de banda de estos[1-3]. En el campo de los sensores nanomecánicos destacan debido a su capacidad para superar la sensibilidad de los resonadores individuales, a través de medidas de localización de los modos[4-6]. Por otro lado, también presentan nuevas aplicaciones, como en el campo de la optomecánica, la transparencia inducida[7] y además conservan todas las características que hacen a los resonadores nanomecánicos tan interesantes.

En esta tesis hemos optado por trabajar con resonadores acoplados mecánicamente por ser el método más utilizado y de más fácil fabricación, ya que simplemente consiste en unir los resonadores mediante un elemento mecánico. De todos modos, los resultados obtenidos son lo suficientemente generales para poder aplicarse a otros tipos de acoplamiento. Entre estos otros tipos de acoplamiento destaca el acoplamiento eléctrico, mediado por fuerzas electrostáticas o capacitivas[8, 9], y que permite modificar el acoplamiento entre los resonadores después de su fabricación y consecuentemente las propiedades del dispositivo[10-12]. Otros tipos de acoplamiento son por ejemplo el acoplamiento hidrodinámico, presente cuando los resonadores se encuentran en un fluido y suficientemente cercanos[13, 14] o el acoplamiento mediado por fuerzas ópticas, cuyo estudio esta generando un gran interés en los últimos años[15].

La analogía de los modos de vibración de dos resonadores acoplados con los niveles de energía de la molécula de hidrogeno[5], o de miles de resonadores con una red cristalina[16, 17], los hace todavía más interesantes desde un punto de vista fundamental. Al igual que ocurre al formarse una molécula de hidrogeno, donde el nivel fundamental de energía del átomo de hidrogeno se desdobra en dos niveles moleculares: enlazante y antienlazante; si tenemos dos resonadores idénticos acoplados, el nivel fundamental se desdoblará en dos niveles energéticos, el simétrico, de menor energía y el antisimétrico. A diferencia de la molécula de hidrogeno, su análogo mecánico permite introducir asimetrías en el sistema y producir la localización de los modos de vibración, es decir, que cada uno de los modos oscile más en uno de los resonadores. Además, el nivel de acoplamiento también se puede modificar, ya sea previo a la fabricación, como en el caso del acoplamiento mecánico, o posterior, como en el eléctrico u óptico. En el caso de tener miles de resonadores, en analogía con las bandas de energía de la red cristalina, se formarán bandas acústicas debidas al desdoble de los modos fundamentales de vibración.

El uso de resonadores nanomecánicos acoplados como sensores de masa es muy reciente[5, 6]. A pesar de su potencial, sus límites de detección no habían sido descritos hasta el presente trabajo[18, 19].

3.2. RESONADORES ACOPLADOS MECÁNICAMENTE

3.2.1. Fabricación

Los resonadores acoplados fueron fabricados por los doctores Cees van Rijn y Hien Duy Tong, en la empresa Nanosens. También han sido utilizados dispositivos fabricados durante una estancia en el grupo del doctor Zachary Davis en la Dansk Technical University (DTU) en el departamento de micro-nanotecnología. Se trata de resonadores acoplados mecánicamente, es decir, en los que existe un elemento mecánico que los une. Sin embargo, nuestros resultados son lo suficientemente generales para extenderse a otros tipos de acoplamiento. Los dispositivos constan de dos o más palancas y una membrana que las une por sus bases (Figura 3.1). Las dimensiones de las palancas y la membrana determinarán el grado de acoplamiento, no siendo posible su variación una vez fabricada la estructura. Cabe destacar en este aspecto que otros tipos de acoplamiento, como el capacitivo[9] o electrostático[8], sí permiten variar el acoplamiento después de la fabricación y por tanto su sensibilidad[10]. Por contra, su proceso de fabricación es mucho más complejo, así como su implementación en líquidos.

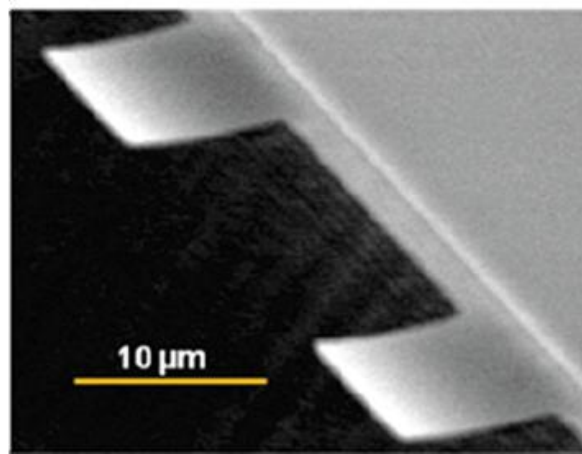


Figura 3.1 Imagen de SEM de uno de nuestros dispositivos acoplados.

La figura 3.2 muestra esquemáticamente los pasos seguidos en el proceso de fabricación:

1. Se han utilizado obleas de silicio, pulidas por ambas caras, de 350μm de espesor.
2. Se crece una capa de 100 nm de nitruro de silicio con baja tensión residual, sobre ambas caras de la oblea, usando el método de deposición química en fase vapor a bajas presiones (LPCVD).

3. Se deposita foto-resina sobre uno de los lados de la oblea, se define el patrón de los resonadores acoplados por fotolitografía y se revela.
4. Mediante un ataque seco por iones reactivos (RIE) se elimina el nitruro de silicio que no está protegido por la resina y posteriormente se elimina esta.
5. Se deposita foto-resina, por el otro lado de la oblea. Se define el mismo patrón que en el lado opuesto, pero sin los resonadores y se vuelve a revelar.
6. De nuevo se realiza un ataque seco en el RIE y se elimina la resina.
7. Finalmente atacamos el silicio introduciendo las obleas en un baño de KOH. El ataque se produce por ambos lados y libera las estructuras.

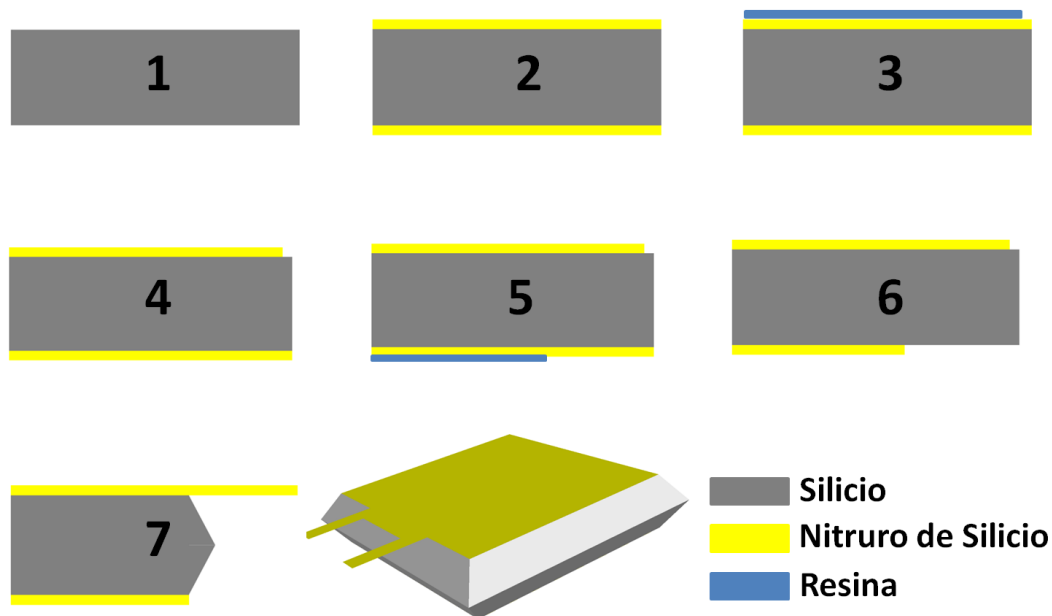


Figura 3.2 Esquema del proceso de fabricación de los resonadores acoplados de nitruro de silicio.

Las palancas de nitruro de silicio miden $25\ \mu\text{m}$ de largo, $10\ \mu\text{m}$ de ancho y $100\ \text{nm}$ de espesor, y la membrana tiene una longitud (L_0) de $8\ \mu\text{m}$, mientras que su ancho (p) varía desde 2 a $100\ \mu\text{m}$ (Figura 3.3). La masa efectiva de las palancas es de $17\ \text{pg}$, lo que las sitúa 3 órdenes de magnitud por debajo de los estudios previos realizados en resonadores acoplados utilizados como sensores[5, 6]. Cabe destacar la dificultad de fabricar palancas acopladas con dimensiones comparables a las tolerancias de la fabricación, en torno a $1\ \mu\text{m}$, dado que si ambas palancas no son perfectamente idénticas afectará al estado de acoplamiento y por tanto a la sensibilidad del dispositivo como mostraremos más adelante.

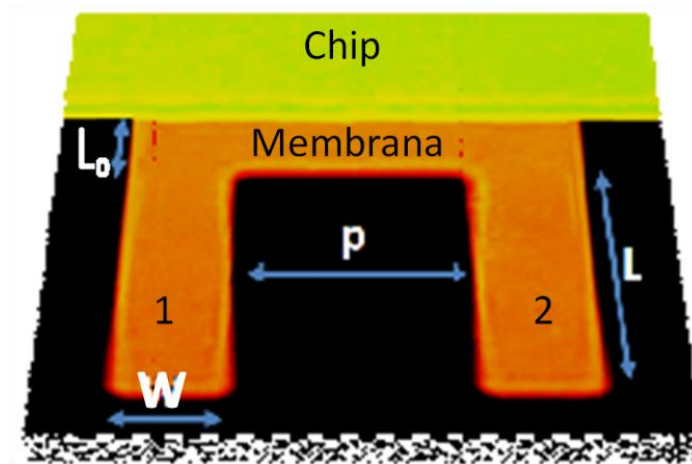


Figura 3.3. Imagen óptica de nuestros dispositivos representando las dimensiones utilizadas.

3.2.2. Caracterización óptica

Para la caracterización de la respuesta dinámica de nuestros dispositivos utilizamos nuestro sistema interferométrico en configuración Michelson. La figura 3.4.a muestra el espectro de ruido termomecánico de uno de nuestros dispositivos en aire y en alto vacío. Al medir en alto vacío, disminuye la disipación producida por el medio, lo que permite que apreciemos la presencia de dos resonancias muy próximas, que como veremos corresponden a modos colectivos de oscilación. La gran resolución espacial de nuestro sistema de caracterización óptica, por debajo de $5\ \mu\text{m}$, permite distinguir las señales provenientes de cada palanca sin ningún problema. La figura 3.4.b muestra los espectros termomecánicos de ambos resonadores. Estos se encuentran separados por apenas $10\ \mu\text{m}$ y muestran un comportamiento dinámico muy similar, por lo que las diferencias iniciales entre los resonadores son muy pequeñas.

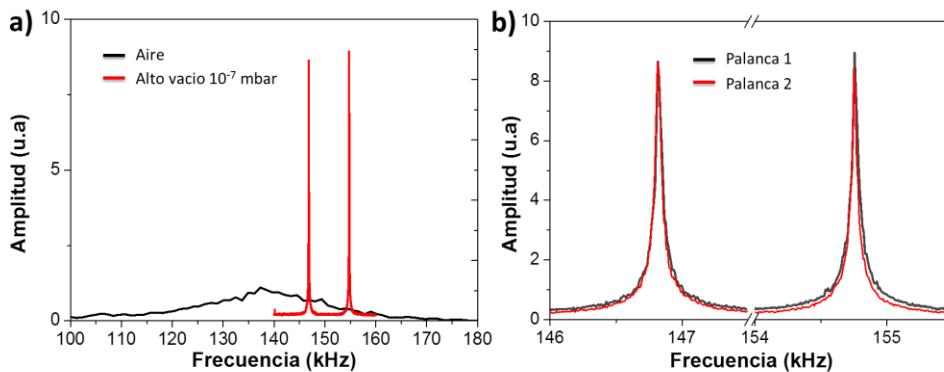


Figura 3.4. (a) Comparación del espectro de ruido termomecánico en aire y en alto vacío de dos resonadores acoplados. (b) Comparación del espectro de ruido termomecánico medido en alto vacío en cada una de las palancas acopladas.

3.3. TEORIA DE RESONADORES ACOPLADOS

Este capítulo nos servirá de introducción a los resonadores acoplados, por lo que nos bastará con tratar los resonadores como osciladores armónicos, sin disipación y acoplados a través de un muelle sin masa (Figura 3.5). Por considerar un muelle sin masa, la presencia de este no altera la energía cinética del sistema pero si su energía potencial, siendo la Lagrangiana del sistema

$$\mathcal{L} = E_c - E_p = \frac{1}{2}m_1\dot{x}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{x}_2^2 - \frac{1}{2}k_1x_1^2 - \frac{1}{2}k_2x_2^2 - \frac{1}{2}k_{12}(x_1 - x_2)^2$$

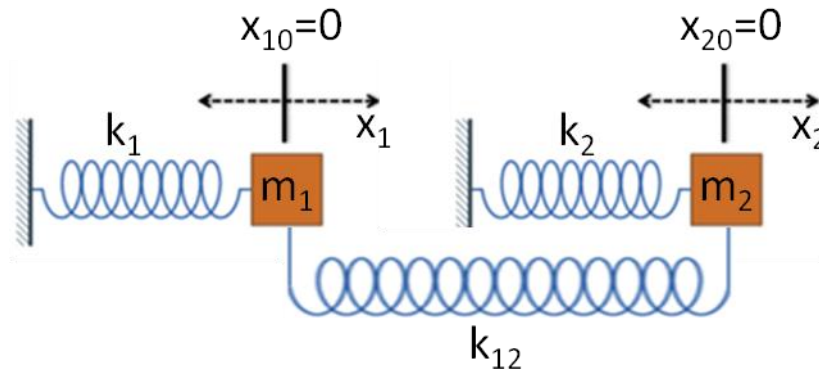


Figura 3.5. Esquema de dos resonadores armónicos sin disipación de energía, acoplados por un resonador sin masa.

Como en la sección 1.3, aplicando las ecuaciones de Lagrange obtenemos, en este caso, el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} m_1\ddot{x}_1 &= -k_1x_1 - k_{12}(x_1 - x_2) \\ m_2\ddot{x}_2 &= -k_2x_2 + k_{12}(x_1 - x_2) \end{aligned}$$

Y suponiendo un movimiento armónico, $x_i = Ae^{i\omega t}$, tenemos

$$-\omega^2 \begin{pmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k_1 - k_{12} & k_{12} \\ k_{12} & -k_2 - k_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

Supongamos por el momento que ambos resonadores tienen la misma masa y constante elástica, $m_1 = m_2 = m$ y $k_1 = k_2 = k$. Dividiendo la ecuación (3.1) entre ω_0^2 , siendo ω_0 la frecuencia de resonancia que tendrían ambos resonadores si estuviesen aislados, ecuación (1.33), se obtiene finalmente

$$\lambda^2 \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \kappa & -\kappa \\ -\kappa & 1 + \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

donde hemos definido la constante de acoplamiento, κ , como la relación entre la constante elástica de la membrana y de la palanca, $\kappa = \frac{k_{12}}{k}$; y $\lambda = \omega/\omega_0$. Las soluciones del problema de autovalores de este sistema de ecuaciones son $\lambda_1^2 = 1$ y $\lambda_2^2 = 1 + 2\kappa$, y por tanto las frecuencias propias de oscilación

$$\omega_{1_0}^2 = \omega_0^2 = \frac{k}{m} \quad ; \quad \omega_{2_0}^2 = \omega_0^2(1 + 2\kappa) = \frac{k+2k_{12}}{m} \quad (3.3)$$

El vector propio correspondiente al primer valor propio es $1/\sqrt{2} [1,1]$, lo que implica que ambos resonadores están oscilando en fase y con la misma amplitud, por lo que le llamaremos modo simétrico, $\omega_1 = \omega_S$. Para el segundo valor propio el vector propio es $1/\sqrt{2} [1, -1]$, por lo que oscilarán en antifase y también con la misma amplitud y le llamaremos modo antisimétrico, $\omega_2 = \omega_A$. La figura 3.6 muestra la forma de estos modos de vibración en el caso de tener dos palancas acopladas a través de una membrana que conecta sus bases.

Además, a partir de las ecuaciones (3.3), tenemos que

$$\kappa = \frac{\omega_{A_0}^2 - \omega_{S_0}^2}{2\omega_{S_0}^2} \quad (3.4)$$

Expresión que nos proporciona la constante de acoplamiento directamente de las frecuencias propias de ambos modos.

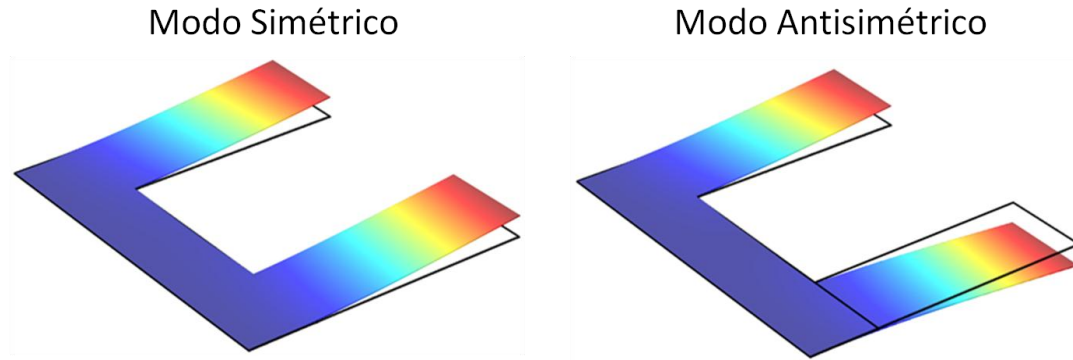


Figura 3.6. Forma del primer modo de oscilación simétrico y antisimétrico, de 2 palancas unidas por sus bases a través de una membrana.

En el caso de tener N resonadores acoplados, el problema se resuelve de forma análoga, por lo que tendremos N modos colectivos de oscilación con los resonadores oscilando en fase o en antifase respecto de sus vecinos, y con diferentes amplitudes, dependiendo del modo de oscilación. Al igual que en el caso de tener dos resonadores, en el primer modo, todos los osciladores vibrarán en fase y con la misma amplitud y en el último, todos estarán en antifase con sus vecinos. En este caso el sistema de ecuaciones se convierte en el siguiente problema de autovalores

$$-\omega^2 \begin{pmatrix} m_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & m_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k_1 + k_{12} & -k_{12} & 0 & \cdots & 0 \\ -k_{12} & k_1 + 2k_{12} & -k_{12} & \cdots & 0 \\ 0 & -k_{12} & k_1 + 2k_{12} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & k_1 + k_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}$$

Que de forma abreviada escribiremos como

$$-\omega^2 \mathbf{M} \vec{u} = \mathbf{K} \vec{u} \quad (3.5)$$

Donde \mathbf{M} es la matriz de masa, \mathbf{K} la matriz de rigidez y \vec{u} el vector de posición, que representa las amplitudes de oscilación de cada palanca. La figura 3.7 muestra uno de los modos de oscilación de una matriz compuesta por 8 resonadores acoplados, así como la medida del ruido termomecánico de uno de ellos en alto vacío.

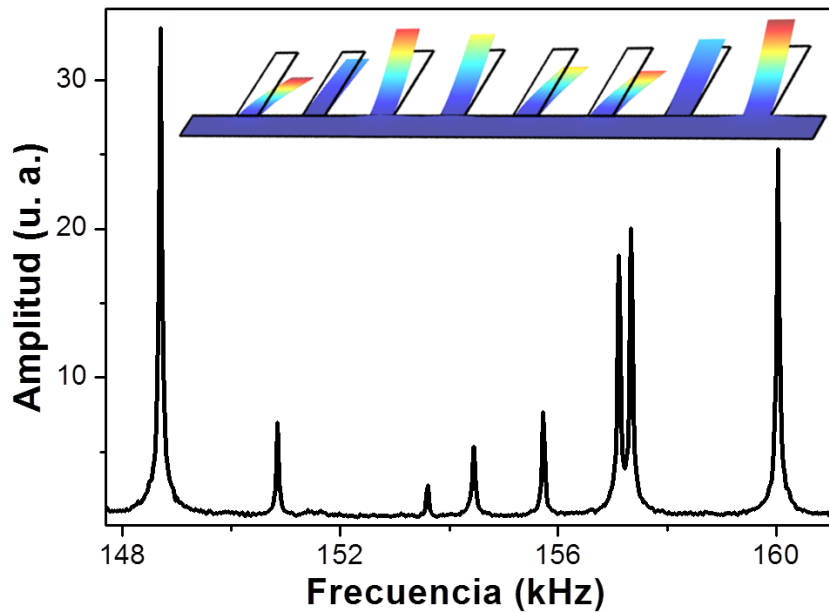


Figura 3.7 Espectro del ruido termomecánico de una palanca en un sistema de 8 acopladas, medido a 10^{-6} mbar. El espectro muestra las resonancias de los 8 modos de oscilación. En el inset vemos la forma del quinto modo colectivo de vibración en la situación ideal de tener 8 palancas idénticas.

Este modelo solo tiene en cuenta el acoplamiento presente entre primeros vecinos, pero como veremos más adelante, en ocasiones, el acoplamiento entre segundos vecinos o incluso más lejanos, no se puede despreciar. Por tanto, utilizando un modelo más completo, la matriz de acoplamiento no tiene términos nulos.

3.3.1. Localización de los modos de vibración

El fenómeno por el cual los resonadores acoplados han despertado un gran interés en el campo de los sensores de masa, es la localización de los modos. Esto ocurre cuando los resonadores dejan de ser idénticos. Volviendo al caso de tener solamente dos resonadores idénticos, cuando sobre uno de ellos se deposita una partícula sobre el extremo libre, $m_2 = (1 + \delta)m$, la ecuación (3.2) toma la forma

$$\lambda^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 + \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \kappa & -\kappa \\ -\kappa & 1 + \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

De donde se obtiene

$$\lambda^2 \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \frac{k}{m} \begin{pmatrix} 1 + \kappa & -\kappa \\ -\kappa & \frac{1+\kappa}{1+\delta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

Si suponemos $\delta \ll \kappa$ y $\kappa \ll 1$, aproximando a primer orden obtenemos para la expresión de las frecuencias de resonancia

$$\omega_S^2 = \omega_0^2 \left(1 - \frac{\delta}{2}\right) \quad ; \quad \omega_A^2 = \omega_0^2 \left(1 + 2\kappa\right) \left(1 - \frac{\delta}{2}\right) \quad (3.6)$$

Esto indica que en un primer momento ambas frecuencias se desplazan en igual medida hacia frecuencias más bajas, siendo la suma de sus desplazamientos igual al que se produciría en una palanca individual. Los nuevos vectores propios, sin normalizar, correspondientes a cada frecuencia son ahora

$$\vec{u}_S = \left[1 - \frac{\delta}{4\kappa}, 1 + \frac{\delta}{4\kappa}\right] \quad ; \quad \vec{u}_A = \left[-1 - \frac{\delta}{4\kappa}, 1 - \frac{\delta}{4\kappa}\right] \quad (3.7)$$

Por lo que la amplitud de vibración de cada modo de oscilación aumenta en una de las palancas, dando lugar a la localización de los modos de vibración.

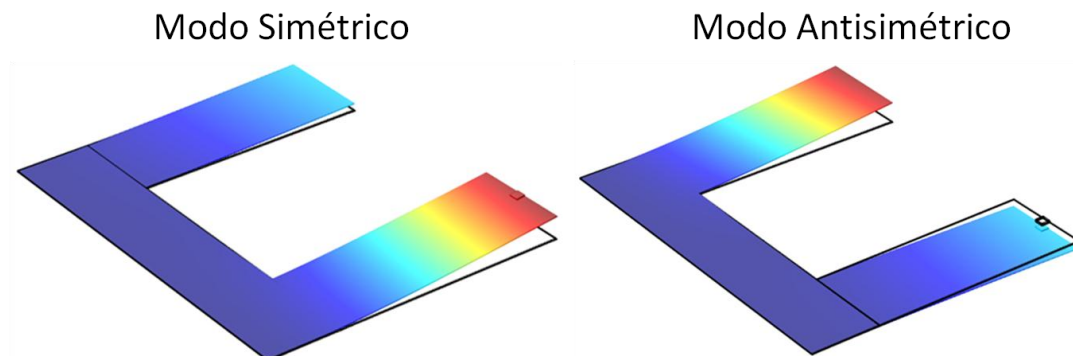


Figura 3.8. Forma de los modos simétrico y antisimétrico, tras una deposición de masa. La localización del modo simétrico se produce en el cantiléver en el cual la masa es depositada y lo contrario ocurre en la palanca inactiva.

Analizando las ecuaciones (3.7), vemos que la palanca sobre la que se añade la masa, la palanca 2, localiza el modo simétrico, mientras que la palanca 1 localiza el modo antisimétrico en igual medida. Que la palanca sobre la que se añade la masa localice el modo simétrico parece lógico, ya que esta disminuirá su frecuencia y el modo simétrico es el que tiene la frecuencia más baja. La figura 3.8 muestra la forma de los modos de oscilación de dos resonadores acoplados que empiezan a localizar los modos debido a la adhesión de una masa sobre el extremo libre de una de ellas. Como hemos indicado, es la palanca sobre la que se añade la masa la que localiza el modo simétrico y viceversa. En el caso de que la masa fuese depositada en el extremo fijo, la frecuencia aumentaría, debido al aumento de la rigidez, y localizaría el modo antisimétrico.

La figura 3.9 muestra la evolución completa de las frecuencias de resonancia de ambos modos y de las amplitudes de oscilación en la palanca 2, sin utilizar aproximaciones, en función de la diferencia de masa relativa. En cuanto a las frecuencias, el modo simétrico poco a poco comienza a desplazarse en mayor medida que el antisimétrico, debido a que el modo simétrico se localiza en la palanca sobre la que se añade masa. Además, sigue cumpliéndose que la suma de los desplazamientos de ambos modos es igual al que se produciría en una palanca aislada. En cuanto a las amplitudes, observamos que la velocidad de localización disminuye conforme aumenta la diferencia de masa. Finalmente, ambas palancas se desacoplan, por lo que cada una resuena únicamente a una frecuencia y solo la frecuencia propia de la palanca 2, el modo que anteriormente llamábamos simétrico, se desplaza, exactamente igual que si estuviesen aislados. En la palanca 1 sucede exactamente lo mismo pero localizando el modo antisimétrico, hasta que finalmente deja de sufrir cambios.

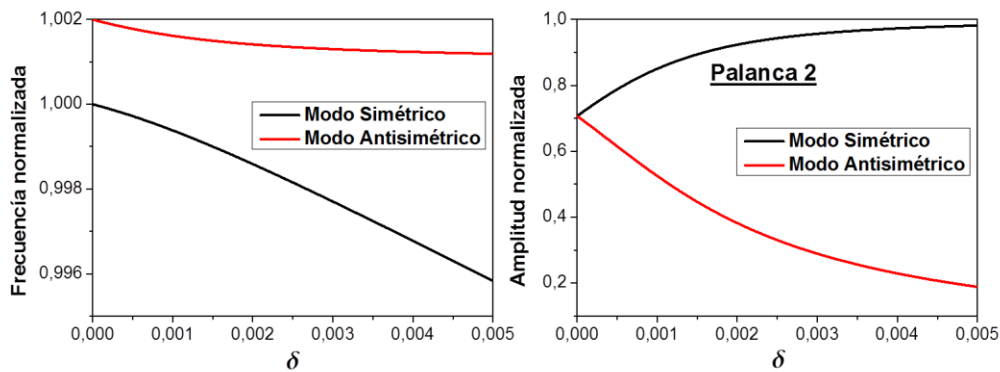


Figura 3.9. Evolución de la localización de los modos de dos palancas acopladas, $\kappa = 0,001$, en función de la diferencia relativa en masa, δ . (a) Frecuencias de resonancia del modo simétrico y antisimétrico normalizadas a la frecuencia de resonancia inicial del modo simétrico. Inicialmente ambas frecuencias se mueven por igual, pero a medida que se localizan los modos, la frecuencia del modo simétrico comienza a desplazarse más que la del antisimétrico, hasta que es la única que se mueve. (b) Amplitudes normalizadas de los modos simétrico y antisimétrico en la palanca 2, sobre la que se añade masa. La palanca localiza el modo simétrico, además, la velocidad de localización decrece a medida que la diferencia entre ambas palancas aumenta. La otra palanca localizará el antisimétrico en igual medida.

Para estas gráficas, se ha considerado una constante de acoplamiento $\kappa = 0,001$. Es muy importante resaltar en este punto que, como veremos más adelante, la evolución de la localización de los modos sería cualitativamente la misma si hubiésemos elegido otra constante de acoplamiento, pero esta ocurriría a otra velocidad. Como vemos en las ecuaciones (3.6) y (3.7), en un instante inicial, el desplazamiento en frecuencia solo depende de la masa relativa añadida, al igual que en un oscilador aislado, mientras que la localización de los modos también depende del acoplamiento entre ambas palancas, siendo inversamente proporcional a éste. Es por este motivo por lo que en el siguiente capítulo introduciremos la siguiente magnitud, $\eta = \frac{\delta}{4\kappa}$, que llamaremos coeficiente del desorden, y como veremos caracteriza de forma más universal la localización de los modos.

Hagamos ahora el análisis de la sensibilidad de los resonadores acoplados tanto en frecuencia como en medidas de localización. A partir de las ecuaciones (1.52), (3.3) y (3.6), podemos hacer un análisis similar al realizado en la sección 1.4.2 para una palanca aislada, y obtener que la sensibilidad en frecuencia de los resonadores acoplados ante una adsorción en una de las palancas en el extremo libre viene dada por

$$\mathcal{R}_{\omega_S} = -\frac{1}{4} \frac{\omega_S}{m_S} \quad ; \quad \mathcal{R}_{\omega_A} = -\frac{1}{4} \frac{\omega_A}{m_A} \quad (3.8)$$

Al compararlas con la obtenida para una palanca aislada, ecuación (1.47), vemos que la sensibilidad de cada modo de oscilación es justamente la mitad que la de una palanca individual. Esto es debido a que el desplazamiento en frecuencia que ocurriría sobre la palanca aislada se distribuye entre las frecuencias colectivas de forma que $\mathcal{R}_{\omega_T} = \sum \mathcal{R}_{\omega_i}$. En el caso de tener dos resonadores tenemos que $\mathcal{R}_{\omega_T} = \mathcal{R}_{\omega_S} + \mathcal{R}_{\omega_A}$, por lo que suponiendo de nuevo que la constante de acoplamiento es muy baja, $\kappa \ll 1$, ambas sensibilidades son prácticamente iguales, $\mathcal{R}_{\omega_S} \approx \mathcal{R}_{\omega_A} \approx \frac{\mathcal{R}_{\omega_{aislado}}}{2}$ y por lo tanto la sensibilidad total será la misma que la del resonador aislado, $\mathcal{R}_{\omega_T} \approx \mathcal{R}_{\omega_{aislado}}$.

En el caso del cálculo de la sensibilidad en medidas de cambios de amplitud, $\mathcal{R}_{A_{n_i}} = \frac{\partial A_n}{\partial m_n}$, tendremos que analizar la variación que se produce en cada oscilador para cada uno de los modos, por lo que de nuevo quedándonos con la aproximación de primer orden tenemos

$$\mathcal{R}_{A_{S_1}} = -\frac{\delta}{4\kappa} \quad \mathcal{R}_{A_{A_1}} = \frac{\delta}{4\kappa} \quad (3.9)$$

$$\mathcal{R}_{A_{S_2}} = \frac{\delta}{4\kappa} \quad \mathcal{R}_{A_{A_2}} = -\frac{\delta}{4\kappa} \quad (3.10)$$

Puesto que la medida del espectro de una de las palancas permitirá la medida del cambio relativo en amplitud y por tanto $\mathcal{R}_{A_i} = \left| \mathcal{R}_{A_{S_i}} - \mathcal{R}_{A_{A_i}} \right|$

$$\mathcal{R}_{A_1} = \mathcal{R}_{A_2} = \frac{\delta}{2\kappa} \quad (3.11)$$

Comparando de nuevo con la sensibilidad en frecuencia de un oscilador individual, tenemos que

$$\mathcal{R}_A / \mathcal{R}_\omega = 1/\kappa \quad (3.12)$$

Por lo que en este caso, la sensibilidad de nuestro sensor ya no solo depende de la masa, como ocurre para un resonador individual, sino que ahora también es inversamente proporcional a la constante de acoplamiento y por tanto, reduciendo esta, podremos aumentar la sensibilidad de nuestro dispositivo sin la necesidad de una extrema miniaturización del mismo, que conlleva mayores dificultades tecnológicas tanto en la fabricación como en la transducción.

3.3.2. Ventajas de los resonadores acoplados como sensores

Como hemos visto en la sección anterior, la principal ventaja de los resonadores acoplados, aplicados como sensores, es debida a la localización de los modos de vibración. En principio, este fenómeno nos permite aumentar la sensibilidad de nuestros dispositivos sin necesidad de disminuir su tamaño, lo que podría permitir superar el límite de detección de los resonadores individuales.

Otra de las ventajas que nos ofrecen estos dispositivos, es la posibilidad de analizar lo que ocurre en varios sensores midiendo solamente en uno de ellos[20]. Esto se debe a que trabajamos con modos colectivos de oscilación y por tanto, una variación en cualquiera de las palancas produciría una variación única en estos modos colectivos. Por tanto, a partir de la medida de los modos y su localización en una sola de nuestras palancas, podríamos saber en cuál de ellas se han producido cambios[6].

Además de tener estas ventajas, en los resonadores acoplados la medida de cambios en frecuencia también está disponible. Conviene destacar en este punto, que la medida conjunta de las frecuencias y de la localización, proporciona a los resonadores acoplados una excelente selectividad. Esto se debe a que deposiciones inespecíficas sobre ambas palancas producirán cambios en las frecuencias de ambos modos, pero suponiendo que la masa depositada sea la misma, no producirá un cambio en la localización. De esta manera podremos discernir entre la masa específica detectada y cambios de masa producidos en ambas palancas de manera inespecífica[21]. Esto no es solamente aplicable a cambios de masa iguales en ambas palancas, sino también a cambios en el medio que las rodean como variaciones de temperatura, presión o humedad, que puedan dar lugar a pequeños cambios en frecuencia que marcarán el límite de detección de los resonadores individuales [22, 23]. Sin embargo estos efectos no afectan a la localización de los modos, por lo que reduciremos en gran medida el ruido, sobretodo en experimentos “ex situ”.

3.4. ESTUDIO DEL ACOPLAMIENTO MECÁNICO

A continuación estudiaremos la dependencia de la constante de acoplamiento mecánico con las dimensiones de la membrana que une las palancas, tanto experimentalmente, como con simulaciones por elementos finitos. El control sobre la constante de acoplamiento, permitirá la fabricación de dispositivos con el grado de acoplamiento óptimo para cada aplicación. Además, una vez caracterizado el acoplamiento de nuestros distintos dispositivos, analizaremos su respuesta ante una masa añadida con el fin de demostrar el incremento de sensibilidad de estos a medida que el acoplamiento decrece.

3.4.1. Resultados experimentales

En primer lugar caracterizamos palancas acopladas en las cuales solamente varia la distancia de separación entre las palancas. La figura 3.10 muestra el espectro del ruido termomecánico de los diferentes dispositivos en los que se observa como a medida que la separación entre las palancas aumenta, las frecuencias de los modos simétrico y antisimétrico se acercan, indicando un descenso del acoplamiento. Las medidas se realizaron en alto vacío (10^{-7} mbar) obteniendo un factor de calidad mecánico en torno a 3500.

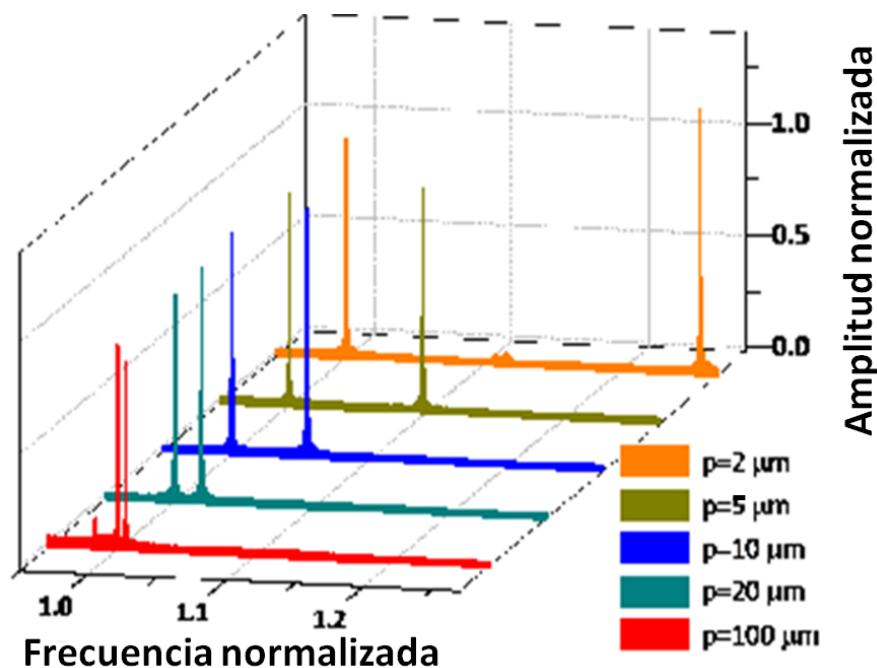


Figura 3.10. Espectros en frecuencia de las fluctuaciones termomecánicas de una de las dos palancas acopladas por una membrana cuya anchura varía desde 2 hasta 100 μm . La frecuencia está normalizada a la frecuencia del modo simétrico de cada uno de los dispositivos. A medida que la distancia entre las palancas aumenta, la separación de las frecuencias de ambos modos disminuye indicando una disminución del acoplamiento.

A partir de la ecuación (3.4) y de la medida de ambas frecuencias, obtenemos la constante de acoplamiento para los distintos dispositivos. Nótese que esta ecuación sólo es válida cuando la diferencia en masa relativa de ambas palancas es despreciable en comparación al acoplamiento. Esto implica que los modos no estén localizados, condición que se cumple para todos los casos como vemos en la figura 3.10, ya que las amplitudes de ambos modos son prácticamente idénticas. La figura 3.11 representa el acoplamiento en función de la distancia entre palancas. Cada punto de la gráfica corresponde con medidas de 4 a 5 dispositivos diferentes. Las barras de error son consecuencia de las desviaciones en la fabricación, y en particular, en la longitud de la membrana de acoplamiento. El mínimo valor obtenido para la constante de acoplamiento es de 0.006, que corresponde al caso en el que las palancas están separadas 100 μm . Los datos experimentales se ajustan muy bien a un comportamiento exponencial, que sugiere estar relacionado con la pérdida de energía debida a la absorción de las ondas mecanoacústicas a lo largo de esta membrana.

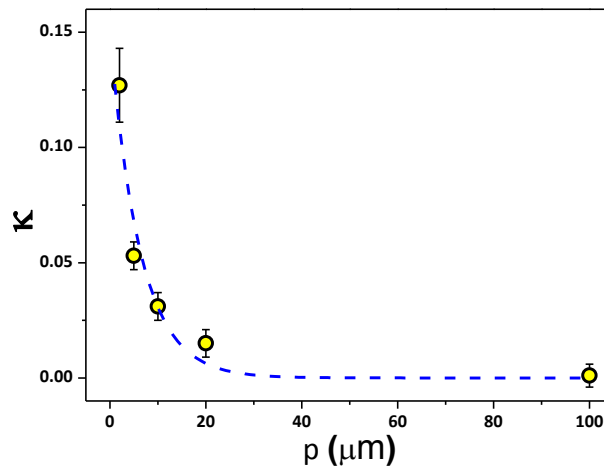


Figura 3.11. Constante de acoplamiento frente a la separación entre las palancas acopladas. La constante de acoplamiento se calcula a partir de las frecuencias de resonancia del modo simétrico y antisimétrico. La línea punteada es un ajuste a una curva exponencial.

3.4.2. Simulaciones por elementos finitos

Para entender con mayor claridad como depende esta constante de acoplamiento con las dimensiones de la membrana, realizamos simulaciones por elementos finitos utilizando el programa COMSOL Multiphysics.

La figura 3.12, representa las frecuencias de los modos simétrico y antisimétrico, de nuevo en función del ancho de la membrana de acoplamiento, para distintas longitudes de esta. Como se puede observar, ambas frecuencias se ven afectadas por la presencia de la membrana. Para explicar porque el modo simétrico también se ve afectado simulamos una palanca aislada pero en presencia de la membrana (puntos rojos). Esta frecuencia coincide con la frecuencia del modo simétrico, lo que confirma que la frecuencia del modo simétrico es igual a la

de la frecuencia de una palanca aislada y que esta se vea modificada no es un efecto del acoplamiento sino producido por la presencia de la membrana[24]. Además, ambas frecuencias se separan a medida que la longitud crece o la separación decrece.

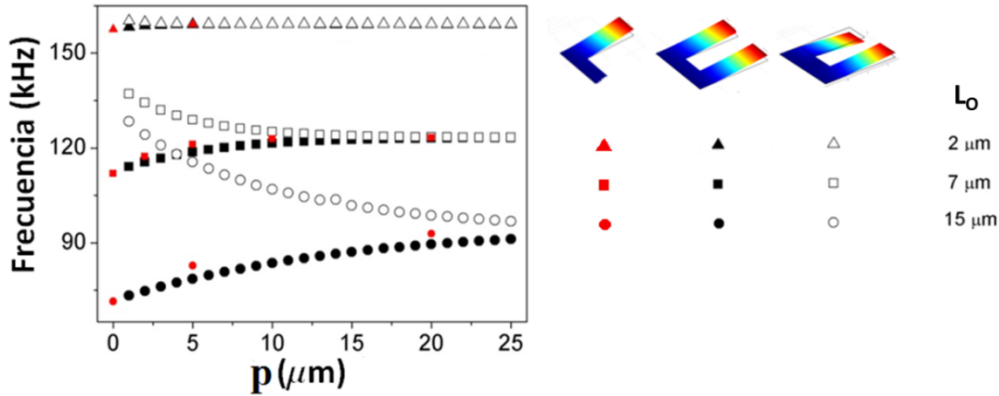


Figura 3.12. Frecuencias de resonancia del modo simétrico (sólido) y antisimétrico (hueco) de dos resonadores acoplados de $25\ \mu\text{m}$ de largo, $10\ \mu\text{m}$ de anchura y $100\ \text{nm}$ de espesor, para diferentes longitudes de membrana en función de la separación de las palancas. Los puntos rojos representan las frecuencias de las palancas aisladas teniendo en cuenta la membrana.

A partir de esas frecuencias obtenemos nuevamente la constante de acoplamiento, teniendo en cuenta la ecuación (3.4). La figura 3.13 muestra el valor de κ , en escala logarítmica, en función de la distancia de las palancas, para diferentes longitudes de la membrana. Como obtuvimos experimentalmente el decaimiento es claramente exponencial. Además, los resultados experimentales encajan perfectamente con las simulaciones para $L_0 = 8 \pm 1\ \mu\text{m}$. Para más información sobre la dependencia de la constante de acoplamiento mecánico con las dimensiones del dispositivo y sus propiedades consultar el Apéndice A.

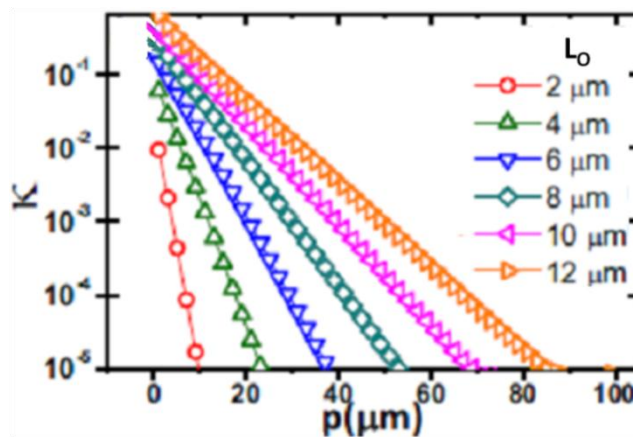


Figura 3.13. Simulaciones por elementos finitos de la constante de acoplamiento de un par de resonadores acoplados en función de su separación, para diferentes longitudes de membrana. Los datos se ajustan perfectamente a una ley exponencial $\kappa = \kappa_0 e^{-p/\lambda}$.

3.5. LOCALIZACIÓN DE LOS MODOS: AUMENTO DE LA SENSIBILIDAD

Una vez caracterizada la constante de acoplamiento mecánico, nuestro siguiente objetivo será probar el aumento de sensibilidad en masa a medida que el acoplamiento decrece. Para ello, utilizaremos la técnica de deposición de carbono, que como vimos en la sección 2.4, nos permite controlar la masa depositada y su localización. Cada vez que introducimos un dispositivo en el SEM esperamos 40 minutos para que la presión se estabilice y de esta forma controlar la masa depositada. En esta ocasión focalizamos el haz sobre el extremo libre de una de las palancas durante 30 minutos, por lo que añadimos unos (204 ± 21) fg. La figura 3.11 muestra el espectro de ruido termomecánico, antes y después de la adición de masa para dos dispositivos diferentes, con separación de 10 y 20 μm . Los espectros están medidos en la misma palanca en la que depositamos. En ambos casos vemos como se localiza el modo simétrico sobre la palanca activa y observáramos lo contrario en la otra. El cambio en frecuencia es prácticamente el mismo, en torno al 0.3 %, en ambos casos para ambas frecuencias, pero en cuanto a la localización observamos que el segundo dispositivo sufre un mayor cambio en las amplitudes relativas debido a tener una constante de acoplamiento más baja. En concreto, el cambio relativo de amplitudes aumenta del 30 al 50 %, disminuyendo a la mitad el acoplamiento.

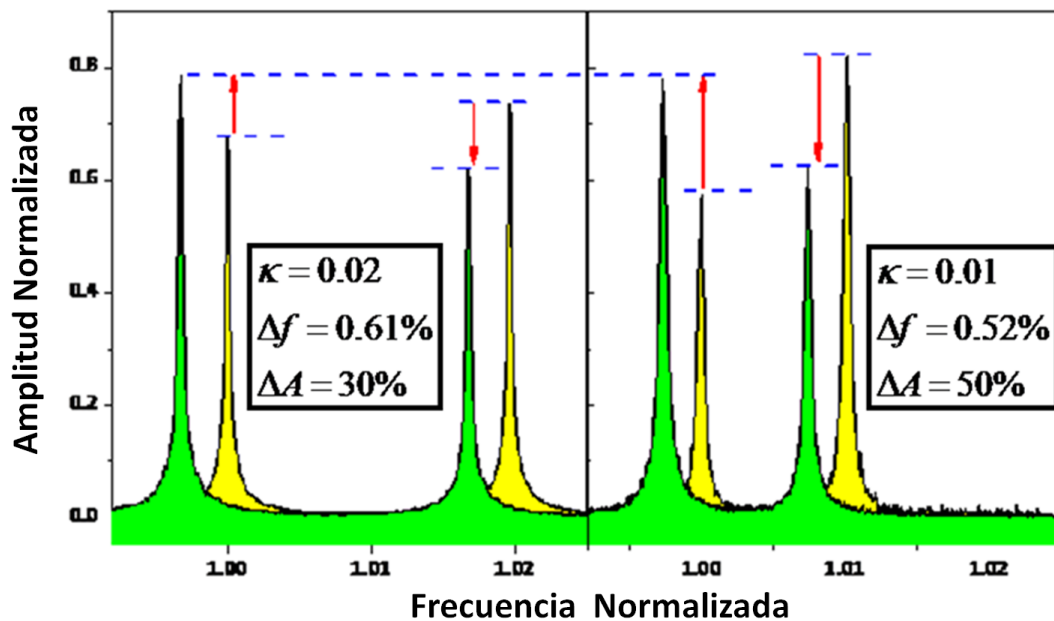


Figura 3.14. Espectro del ruido termomecánico de una de las dos palancas acopladas, antes (amarillo) y después (verde) de depositar $204 \pm$ fg de carbono sobre la palanca que medimos. (a) $p=10 \mu\text{m}$ (b) $p=20 \mu\text{m}$. En ambos casos cada frecuencia decrece en torno al 0.3 %, mientras tanto la variación de amplitud relativa pasa del 30 % al 50 % disminuyendo a la mitad la constante elástica.

Realizando este mismo experimento para todos nuestros dispositivos, demostramos como la sensibilidad de los resonadores acoplados aumenta, en medidas de la localización de los modos, a medida que el acoplamiento disminuye. Esto lo podemos ver claramente en la figura 3.15, donde representamos la variación relativa de amplitud entre la variación relativa en frecuencia, en función del acoplamiento. Esta representación nos permite comparar los métodos de localización de los modos y cambio en frecuencia. Y además nos permite eliminar pequeñas desviaciones en la medida del cambio relativo de amplitud debidas a la variación de la masa depositada. Los datos experimentales y la teoría muestran un gran acuerdo. La sensibilidad en masa crece rápidamente conforme el acoplamiento disminuye, mostrando cambios relativos de amplitud más de 2 órdenes de magnitud mayores que los cambios relativos de frecuencia[18].

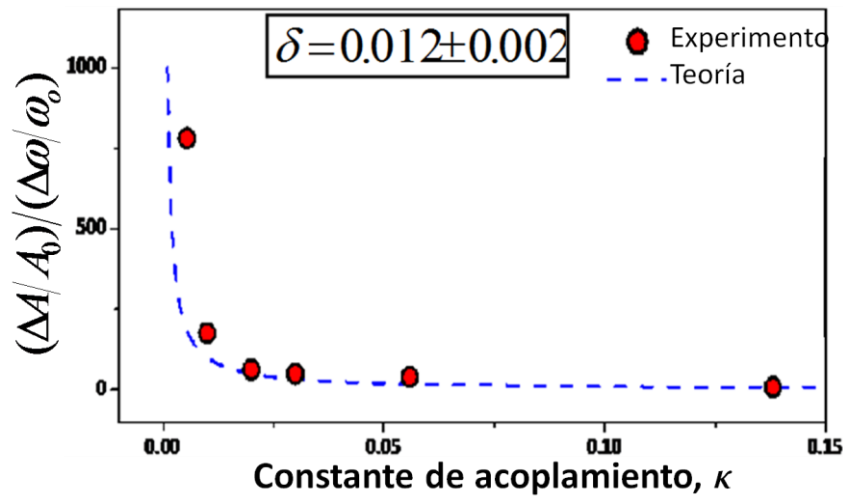


Figura 3.15. Relación entre la variación relativa de amplitud y la variación relativa en frecuencia, en función de la constante de acoplamiento. En cada uno de los dispositivos se ha depositado una masa aproximada de 204 fg. Los símbolos representan los datos experimentales y la línea punteada el ajuste teórico δ/κ .

Tras haber demostrado el aumento de sensibilidad de los resonadores acoplados conforme el acoplamiento disminuye, en el siguiente capítulo estudiaremos el límite de detección de estos dispositivos y lo compararemos con un resonador aislado. Para ello, lo primero que haremos será estudiar de forma detallada el comportamiento dinámico de los resonadores acoplados.

REFERENCIAS

1. Galayko, D., Kaiser, A., Legrand, B., Buchaillet, L., Combi, C., Collard, D. "*Coupled-resonator micromechanical filters with voltage tuneable bandpass characteristic in thick-film polysilicon technology*" Sensors and Actuators a-Physical, **126**, 1 (2006).
2. Greywall, D.S., Busch, P.A. "*Coupled micromechanical drumhead resonators with practical application as electromechanical bandpass filters*" Journal of Micromechanics and Microengineering, **12**, 6 (2002).
3. Chandrahali, H., Bhav, S.A., Ieee "*Digitally-tunable MEMS filter using mechanically-coupled resonator array*" Mems 2008: 21st Ieee International Conference on Micro Electro Mechanical Systems, Technical Digest.
4. Feng, J., Ye, X., Esashi, M., Ono, T. "*Mechanically coupled synchronized resonators for resonant sensing applications*" Journal of Micromechanics and Microengineering, **20**, 11 (2010).
5. Spletzer, M., Raman, A., Wu, A.Q., Xu, X., Reifenberger, R. "*Ultrasensitive mass sensing using mode localization in coupled microcantilevers*" Applied Physics Letters, **88**, 25 (2006).
6. Spletzer, M., Raman, A., Sumali, H., Sullivan, J.P. "*Highly sensitive mass detection and identification using vibration localization in coupled microcantilever arrays*" Applied Physics Letters, **92**, 11 (2008).
7. Smith, D.D., Chang, H., Fuller, K.A., Rosenberger, A.T., Boyd, R.W. "*Coupled-resonator-induced transparency*" Physical Review A, **69**, 6 (2004).
8. Pourkamali, S., Ayazi, F. "*Electrically coupled MEMS bandpass filters - Part II. Without coupling element*" Sensors and Actuators a-Physical, **122**, 2 (2005).
9. Pourkamali, S., Ayazi, F. "*Electrically coupled MEMS bandpass filters - Part I: With coupling element*" Sensors and Actuators a-Physical, **122**, 2 (2005).
10. Thiruvengatanathan, P., Yan, J., Woodhouse, J., Aziz, A., Seshia, A.A. "*Ultrasensitive mode-localized mass sensor with electrically tunable parametric sensitivity*" Applied Physics Letters, **96**, 8 (2010).
11. Thiruvengatanathan, P., Yan, J., Woodhouse, J., Seshia, A.A. "*Enhancing Parametric Sensitivity in Electrically Coupled MEMS Resonators*" Journal of Microelectromechanical Systems, **18**, 5 (2009).
12. Hamad, E., Omar, A. "*An improved two-dimensional coupled electrostatic-mechanical model for RF MEMS switches*" Journal of Micromechanics and Microengineering, **16**, 7 (2006).
13. Basak, S., Raman, A. "*Hydrodynamic coupling between micromechanical beams oscillating in viscous fluids*" Physics of Fluids, **19**, 1 (2007).
14. Hosaka, H., Itao, K. "*Coupled vibration of microcantilever array induced by airflow force*" Journal of Vibration and Acoustics-Transactions of the Asme, **124**, 1 (2002).
15. Povinelli, M.L., Loncar, M., Ibanescu, M., Smythe, E.J., Johnson, S.G., Capasso, F., Joannopoulos, J.D. "*Evanescent-wave bonding between optical waveguides*" Optics Letters, **30**, 22 (2005).

16. Zalalutdinov, M.K., Baldwin, J.W., Marcus, M.H., Reichenbach, R.B., Parpia, J.M., Houston, B.H. "*Two-dimensional array of coupled nanomechanical resonators*" Applied Physics Letters, **88**, 14 (2006).
17. Dorignac, J., Gaidarzhy, A., Mohanty, P. "*Response spectrum of coupled nanomechanical resonators*" Journal of Applied Physics, **104**, 7 (2008).
18. Gil-Santos, E., Ramos, D., Pini, V., Calleja, M., Tamayo, J. "*Exponential tuning of the coupling constant of coupled microcantilevers by modifying their separation*" Applied Physics Letters, **98**, 12 (2011).
19. Gil-Santos, E., Ramos, D., Jana, A., Calleja, M., Raman, A., Tamayo, J. "*Mass Sensing Based on Deterministic and Stochastic Responses of Elastically Coupled Nanocantilevers*" Nano Letters, **9**, 12 (2009).
20. DeMartini, B.E., Rhoads, J.F., Shaw, S.W., Turner, K.L. "*Single input-single output mass sensor based on a coupled array of microresonators*" Sensors and Actuators a-Physical, **137**, 1 (2007).
21. Thiruvengatanathan, P., Yan, J., Seshia, A.A., Ieee "*Common mode rejection in electrically coupled MEMS resonators utilizing mode localization for sensor applications*" 2009 Joint Meeting of the European Frequency and Time Forum and the Ieee International Frequency Control Symposium.
22. Mertens, J., Finot, E., Thundat, T., Fabre, A., Nadal, M.H., Eyraud, V., Bourillot, E. "*Effects of temperature and pressure on microcantilever resonance response*" Ultramicroscopy, **97**, 1-4 (2003).
23. Sandberg, R., Svendsen, W., Molhave, K., Boisen, A. "*Temperature and pressure dependence of resonance in multi-layer microcantilevers*" Journal of Micromechanics and Microengineering, **15**, 8 (2005).
24. Alvarez, M., Tamayo, J., Plaza, J.A., Zinoviev, K., Dominguez, C., Lechuga, L.M. "*Dimension dependence of the thermomechanical noise of microcantilevers*" Journal of Applied Physics, **99**, 2 (2006).

Capítulo 4

Detección de masa basada en la respuesta ante fuerzas externas y el ruido termomecánico de resonadores acoplados

En este capítulo se estudiara la sensibilidad en masa de los resonadores acoplados cuando son excitados por una fuerza externa o fluctúan excitados por fuerzas térmicas. Se verá que ambos métodos proporcionan información diferente y complementaria, sobre la masa añadida y su localización. Proponemos un modelo que combina la teoría del oscilador armónico con disipación de energía y el teorema de fluctuación disipación. Demostraremos que la medida del ruido termomecánico nos proporciona información más precisa sobre la palanca en la que se ha producido la deposición. Por otro lado, la respuesta ante fuerzas externas posee un rango dinámico más amplio, lo cual permite que haya mayores diferencias iniciales entre las palancas sin que se pierda sensibilidad.

A continuación, se analizará el límite termomecánico de detección en masa que posee la medida de la localización de los modos, comparándolo con el de una palanca aislada. Evidenciaremos que los resonadores acoplados serán útiles, desde este punto de vista, cuando la constante de acoplamiento sea menor que el doble del inverso del factor de calidad. Además, destacaremos la que es sin duda su mayor virtud, la selectividad.

Por último, tras presentar las conclusiones de los últimos dos capítulos, avanzaremos hacia donde se dirigen las próximas investigaciones del grupo. Entre ellas destacar, el estudio de la sensibilidad en función del número de resonadores y las aplicaciones biológicas, como la detección de proteínas o ADN.

4.1. RESPUESTA DE LOS RESONADORES ACOPLADOS

Una característica fundamental de los modos colectivos de vibración es que no todos ellos poseen la misma capacidad de excitación ante fuerzas externas, lo que influirá en la sensibilidad de estos dispositivos. En este capítulo analizaremos el caso de la excitación mecanoacústica, pero en general nuestros resultados son válidos para todo tipo de excitaciones, como el capacitivo, el electroestático o el magnético. Generalmente, las fuerzas actúan en fase sobre ambos resonadores y por tanto, la eficiencia de excitación dependerá de la forma de los modos, es decir, de la amplitud y fase relativa de las palancas. Por ejemplo, en el caso de tener dos resonadores idénticos, el modo antisimétrico no amplificará su movimiento ya que las palancas oscilan en antifase, mientras que las fuerzas actúan en fase sobre ambas. Como veremos, a medida que se produce la localización de los modos, la eficiencia de excitación del modo antisimétrico crecerá.

Por otro lado, la medida del ruido termomecánico permite observar ambos modos debido a que el movimiento Browniano carece de coherencia espacio-temporal. La figura 4.1 compara el espectro de ruido termomecánico y la respuesta forzada en dos resonadores acoplados. Cuando usamos la excitación mecanoacústica, la amplitud del modo simétrico es 50 veces la del antisimétrico. Este suceso ocurre en completa analogía con la excitación mecanoacústica de modos torsionales en una palanca aislada, que como ha sido estudiado, requiere de asimetrías en el diseño de las palancas[1]. La convolución de la localización de los modos y de la eficiencia de excitación de los mismos, determinará la sensibilidad de nuestros dispositivos y producirá que dentro de la matriz de resonadores unos sean más sensibles que otros.

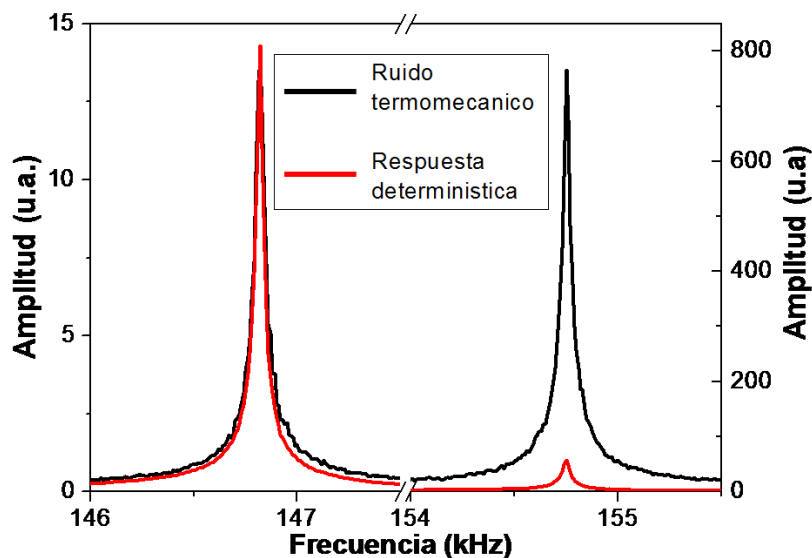


Figura 4.1 Espectro del ruido termomecánico (negro) y de la respuesta forzada (rojo) de dos resonadores nanomecánicos acoplados y prácticamente idénticos.

Pese a que los resonadores acoplados, así como la localización de los modos, ha sido utilizada para la detección de masa recientemente[2-4], todavía no ha sido establecida una descripción detallada del comportamiento dinámico de este tipo de sistemas, especialmente en el caso de la respuesta ante fuerzas externas. Para estudiar las diferencias entre ambas respuestas y los límites de detección en medidas de localización, introducimos en el modelo utilizado en el capítulo 3, la disipación de energía en las palancas (Figura 4.2).

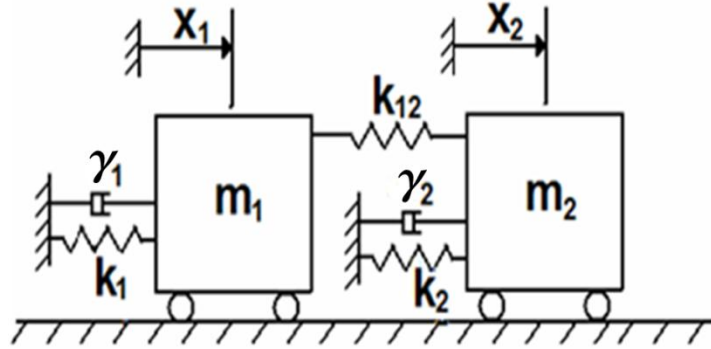


Figura 4.2. Esquema de dos osciladores armónicos con disipación acoplados por un resonador sin masa y sin disipación.

Como hicimos en la sección 1.3.1 para resonadores individuales, a partir de la susceptibilidad mecánica de nuestro sistema, obtendremos tanto la respuesta ante fuerzas externas como a las fluctuaciones térmicas. En este caso, la susceptibilidad mecánica de nuestro sistema es una matriz y se expresa como

$$\chi(\omega) = (-\mathbf{M}\omega^2 + i\omega\boldsymbol{\gamma} + \mathbf{K})^{-1} \quad (4.1)$$

Donde $\mathbf{M} = \begin{pmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 \\ 0 & \gamma_2 \end{pmatrix}$ y $\mathbf{K} = \begin{pmatrix} \kappa_1 + \kappa_{12} & -\kappa_{12} \\ -\kappa_{12} & \kappa_2 + \kappa_{12} \end{pmatrix}$.

Si como en el capítulo anterior suponemos resonadores idénticos con una leve diferencia entre sus masas: $k_1 = k_2 = k$, $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$, $m_1 = m$ y $m_2 = (1 + \delta)m$; y definimos $\xi = \frac{\gamma}{2\sqrt{mk}}$, la ecuación (4.1) la describimos como

$$\chi(\omega) = \frac{1}{\kappa} \mathbf{A} \cdot \frac{1}{\det \mathbf{A}} \quad (4.2)$$

Donde $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -\lambda^2(1 + \delta) + j2\xi\lambda + 1 + \kappa & \kappa \\ \kappa & -\lambda^2 + j2\xi\lambda + 1 + \kappa \end{pmatrix}$. O también de la forma

$$\chi(\omega) = \frac{1}{\kappa} \mathbf{A} \cdot \frac{(1 + \kappa - \lambda^2)(1 + \kappa - \lambda^2(1 + \delta)) - 4\xi^2\lambda^2 - \kappa^2 - 2j\xi\lambda(2 + 2\kappa - \lambda^2(2 + \delta))}{[(1 + \kappa - \lambda^2)(1 + \kappa - \lambda^2(1 + \delta)) - 4\xi^2\lambda^2 - \kappa^2]^2 + 4\xi^2\lambda^2(2 + 2\kappa - \lambda^2(2 + \delta))^2} \quad (4.3)$$

A partir de ahora supondremos que $\xi \ll 1$ y por lo tanto, las frecuencias de resonancia del oscilador, se pueden suponer las mismas que para el oscilador sin disipación. Como ya vimos, para factores de calidad del orden de 1000, esta suposición es completamente válida. Para obtener las frecuencias propias igualamos el determinante de la susceptibilidad a cero, por lo que estas deben de cumplir

$$(-\lambda^2(1 + \delta) + 1 + \kappa)(-\lambda^2 + 1 + \kappa) - \kappa^2 = 0 \quad (4.4)$$

De donde obtenemos el mismo resultado que en el capítulo 3. Suponiendo de nuevo $\delta \ll \kappa$ y $\kappa \ll 1$, y aproximando en esta ocasión a segundo orden, los valores propios son

$$\lambda_1^2 = 1 - \frac{\delta}{2} - \delta^2 \left(\frac{1-2\kappa}{\delta\kappa} \right) \quad (4.5)$$

$$\lambda_2^2 = (1 + 2\kappa) \left(1 - \frac{\delta}{2} + \delta^2 \left(\frac{1-2\kappa}{\delta\kappa} \right) \right) \quad (4.6)$$

4.1.1. Ruido termomecánico

Como vimos en la sección 1.5.1, la respuesta debida a las fuerzas térmicas se relaciona con la respuesta ante fuerzas externas a través del teorema de fluctuación disipación[5]. En el caso de tener resonadores acoplados, de acuerdo con el teorema de fluctuación disipación, la matriz de la densidad espectral, $\mathbf{S}(\omega)$, se relaciona con la susceptibilidad mecánica a través de [6]

$$\mathbf{S}(\omega) = -\frac{2k_B T}{\pi\omega} (\mathbf{X}_I^S + i\mathbf{X}_R^A) \quad (4.7)$$

Donde $\mathbf{X}_I^S = (Im(\mathbf{X}) + Im(\mathbf{X})^T)/2$ es la parte imaginaria, simétrica, y $\mathbf{X}_R^A = (Re(\mathbf{X}) - Re(\mathbf{X})^T)/2$ es la parte real, antisimétrica de \mathbf{X} . Los elementos diagonales de la matriz, $S_{ii}(\omega)$, serán las densidades espectrales propias de cada resonador y estará relacionada con la amplitud de oscilación a las frecuencias de resonancia a través de $\langle w^2 \rangle = \int_0^\infty S_{a_n}(\omega) d\omega$. Mientras que los elementos cruzados determinan la correlación del movimiento entre ambos resonadores. Sustituyendo las ecuaciones (4.5) y (4.6) en (4.7) y quedándonos con los elementos diagonales, obtenemos la densidad espectral de cada resonador para cada modo, que aproximando de nuevo a segundo orden se expresan como

$$\begin{aligned} S_{11}(\omega_S) &= \frac{k_B T}{\gamma\omega_0^2} [1 - 2(1 - \kappa)\eta + 2\kappa\eta^2] \\ S_{22}(\omega_S) &= \frac{k_B T}{\gamma\omega_0^2} [1 + 2(1 - \kappa)\eta + 2\kappa\eta^2] \\ S_{11}(\omega_A) &= \frac{k_B T}{\gamma\omega_0^2(1+2\kappa)} [1 + 2(1 + 3\kappa)\eta - 2\kappa(1 + 2\kappa)\eta^2] \\ S_{22}(\omega_A) &= \frac{k_B T}{\gamma\omega_0^2(1+2\kappa)} [1 - 2(1 + \kappa)\eta - 2\kappa(1 + 2\kappa)\eta^2] \end{aligned} \quad (4.8)$$

Donde se ha definido el coeficiente de asimetría, η , como $\eta = \frac{\delta}{4\kappa}$. La introducción de este coeficiente se debe a que proporciona una descripción más universal de la respuesta de este tipo de dispositivos. Como vemos en la aproximación analítica de las densidades espectrales a las frecuencias de resonancia, relacionada con la amplitud de oscilación a través de la ecuación (1.56), la localización de los modos no depende solamente de la diferencia de masa relativa de los resonadores, sino de la relación entre esta diferencia y la constante de acoplamiento. La figura 4.3.a muestra como en el estado inicial ambos resonadores oscilan aproximadamente con la misma amplitud para cada modo. Una vez se añade masa a la palanca 2, esta empieza a localizar el modo simétrico y al mismo tiempo la palanca inactiva localiza el antisimétrico a la misma velocidad. La medida de ruido térmico permite observar la localización de los modos de forma directa, siendo muy fácil discernir sobre que palanca se ha depositado la masa.

La medida de la relación de amplitudes nos facilita las cosas a la hora de comparar espectros antes y después de una deposición, ya que nos permite no calibrar las amplitudes en cada medida. La relación de las amplitudes viene determinada, en su aproximación a segundo orden, por

$$a_1^T = \sqrt{\frac{S_{11}(\omega_A)}{S_{11}(\omega_S)}} = \frac{1}{\sqrt{1+2\kappa}} [1 + 4(1+\kappa)\eta + 4(2-\kappa)\eta^2]^{1/2} \quad (4.9)$$

$$a_2^T = \sqrt{\frac{S_{22}(\omega_A)}{S_{22}(\omega_S)}} = \frac{1}{\sqrt{1+2\kappa}} [1 - 4(1+\kappa)\eta + 4(2+3\kappa)\eta^2]^{1/2} \quad (4.10)$$

4.1.2. Fuerzas externas

La respuesta ante fuerzas externas se obtiene a partir de la ecuación (4.3) y aplicando $\hat{z}(\omega) = \chi(\omega) \hat{f}(\omega)$. En nuestro caso la fuerza externa se trata de una fuerza que actúa en fase sobre ambas palancas, $f^T = f_0(1,1)$. Aplicando la condición de la ecuación (4.4) y $\xi \ll 1$, obtenemos

$$\begin{pmatrix} x_1(\lambda_i) \\ x_2(\lambda_i) \end{pmatrix} = \frac{1}{j2\kappa\xi\lambda_i(2+2\kappa-\lambda_i^2(2+\delta))^2} \begin{pmatrix} -\lambda_i^2(1+\delta) + 1 + \kappa & \kappa \\ \kappa & -\lambda_i^2 + 1 + \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} f_0 \quad (4.11)$$

Y teniendo en cuenta la ecuaciones (4.5) y (4.6), tenemos finalmente las amplitudes de los modos de vibración en cada palanca, que en su aproximación a segundo orden se expresan como

$$\begin{aligned} A_1(\omega_S) &= -\frac{if_0}{\xi\kappa} [1 - (1-\kappa)\eta - (1-2\kappa)\eta^2] \\ A_2(\omega_S) &= -\frac{if_0}{\xi\kappa} [1 + (1+\kappa)\eta - \eta^2] \\ A_1(\omega_A) &= -\frac{if_0}{\xi\kappa} \sqrt{1+2\kappa\eta} [1 + (1+\kappa)\eta] \\ A_2(\omega_A) &= \frac{if_0}{\xi\kappa} \sqrt{1+2\kappa\eta} [1 - (1+3\kappa)\eta] \end{aligned} \quad (4.12)$$

El mismo tratamiento se podría aplicar a otro tipo de excitaciones como la excitación en antifase, en la que $f^T = f_0(1, -1)$ o la excitación sobre una sola de las palancas, $f^T = f_0(1, 0)$, que podrían implementarse mediante excitaciones ópticas o por ultrasonidos[7].

La figura 4.3.b representa estas amplitudes función del coeficiente de asimetría. Cuando las palancas son perfectamente simétricas, $\eta = 0$, la amplitud del modo antisimétrico en ambas palancas es nula debido a que este modo no se puede excitar, en acuerdo con el espectro obtenido en la figura 4.1. A medida que aumenta el desorden, η , en un primer momento ambas palancas comienzan a excitarse en el modo antisimétrico, haciéndose difícil distinguir sobre que palanca se está depositando la masa. Conforme η sigue aumentando, el modo antisimétrico comienza a localizarse de forma notable en la palanca inactiva, mientras que en la palanca que se deposita la masa los cambios son menos apreciables.

Lo que en realidad observamos cuando medimos la respuesta de los resonadores acoplados ante una fuerza externa, no es solo la localización de los modos, sino la convolución de la localización con la eficiencia de la fuerza. Como consecuencia, la sensibilidad de ambas palancas es distinta, siendo más efectivo, en el caso de tener dos resonadores y detectar masa, medir en la palanca inactiva.

A partir de las ecuaciones (4.12) obtenemos las relaciones de amplitud en cada resonador, que en su aproximación analítica a segundo orden toman la forma

$$a_1^D = \frac{A_1(\omega_A)}{A_1(\omega_S)} = \sqrt{1 + 2\kappa[1 + 2\eta]\eta} \quad (4.13)$$

$$a_2^D = \frac{A_2(\omega_A)}{A_2(\omega_S)} = \sqrt{1 + 2\kappa[1 - 2(1 + 2\kappa)\eta]\eta} \quad (4.14)$$

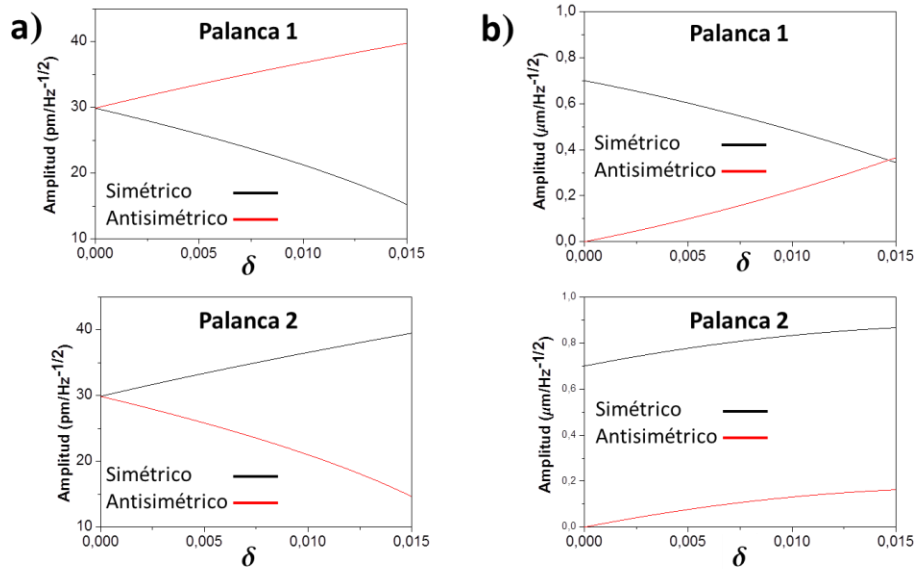


Figura 4.3. Amplitud de oscilación de dos resonadores acoplados ($\kappa=0,01$) a la frecuencia de resonancia del modo simétrico (negro) y antisimétrico (rojo), en función de la diferencia de masa relativa depositada en la palanca 2: a) Ruido termomecánico ($T=298$ K , $B=1$ Hz) b) Respuesta forzada ($F_0=1$ pN).

4.2. DETECCIÓN DE MASA

En esta sección compararemos experimentalmente la detección de masa por localización de los modos, mediante la medida de la respuesta ante el ruido termomecánico y ante fuerzas externas. La figura 4.4 muestra el espectro de ruido termomecánico, antes y después de una deposición de masa de 170 fg en la palanca 2. Las amplitudes están normalizadas a la amplitud del modo simétrico. La variación de amplitudes relativa en ambos casos se encuentra alrededor del 7% pero su comportamiento es el opuesto, la palanca activa localiza el modo simétrico mientras la inactiva el antisimétrico. Como vimos teóricamente, la medida de ruido termomecánico nos permite saber fácilmente en que palanca hemos depositado la masa, ya que la respuesta de ambas es opuesta.

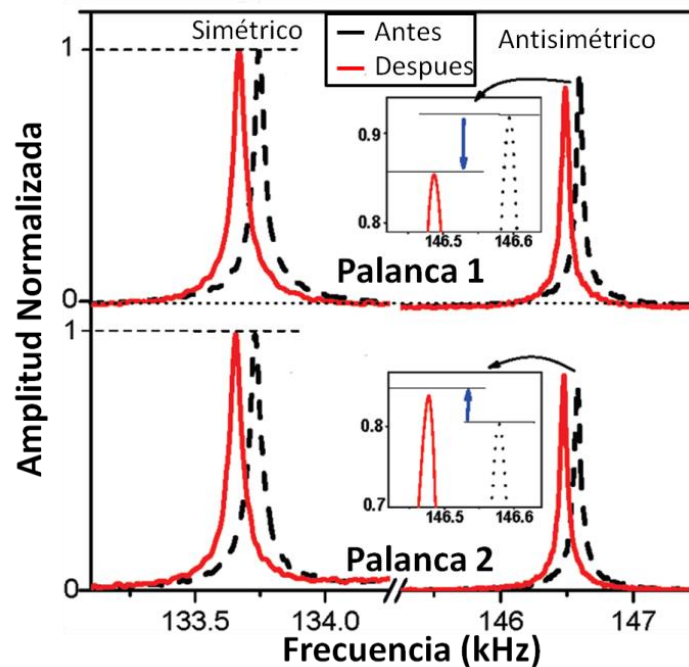


Figura 4.4. Espectro del ruido termomecánico de dos resonadores acoplados, antes (línea punteada negra) y después (línea continua roja), de la deposición de (170 ± 17) fg de carbono en la palanca 2. Las amplitudes están normalizadas a la del modo simétrico. El inset muestra un zoom del cambio relativo en amplitud. La palanca sobre la que se deposita la masa localiza el modo simétrico.

Por otro lado, en el caso de la respuesta forzada, figura 4.5, la amplitud del modo antisimétrico crece aproximadamente un 2.5% en ambas palancas, lo que hace muy difícil discernir sobre cual de las palancas se ha depositado la masa. Pese a que es difícil de detectar, si que existen pequeñas diferencias entre ambas palancas, dado que en la inactiva el modo antisimétrico crece un poco más, ya que esta empieza a localizarlo.

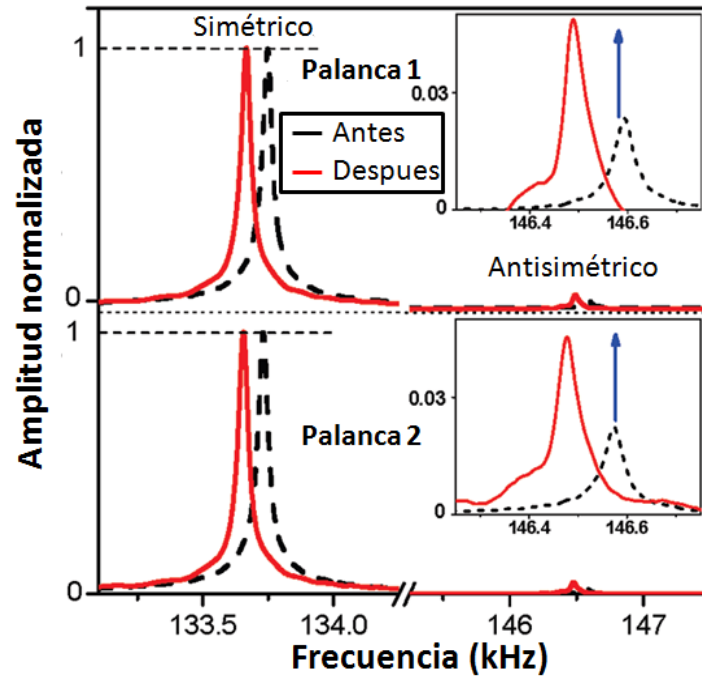


Figura 4.5. Espectro de la respuesta ante fuerzas externas de dos resonadores acoplados, antes (línea punteada negra) y después (línea continua roja) de la deposición de (170 ± 17) fg de carbono en la palanca 2. Las amplitudes están normalizadas a la del modo simétrico. El inset muestra un zoom del cambio relativo en amplitud. En ambas palancas aumenta la amplitud del modo antisimétrico debido al aumento de la eficiencia de excitación.

Para comprobar experimentalmente las relaciones de las ecuaciones (4.9), (4.10), (4.13) y (4.14), elegimos un dispositivo que presentan una constante de acoplamiento de $\kappa = 0.01$. Una vez caracterizada, depositamos carbono amorfo sobre una de ellas, en este caso la palanca 2, y repetimos esta operación en varias ocasiones. La figura 4.6 representa la relación de amplitudes en función del coeficiente de asimetría, para el caso de medir la respuesta ante el ruido termomecánico. La línea sólida representa la teoría sin ninguna aproximación, la discontinua la aproximación a segundo orden, ecuaciones (4.9) y (4.10), mientras que los puntos son datos experimentales. Como vemos, la aproximación a segundo orden es válida hasta que $\eta > 0.25$, lo que implica $\delta > \kappa$. Los datos experimentales, concuerdan muy bien con la teoría. Cuando el desorden es nulo, el modo simétrico posee mayor amplitud para ambas palancas. A medida que este aumenta, la palanca 1 localiza el modo antisimétrico, mientras que el modo simétrico se localiza en la palanca 2. En este caso, la variación relativa en ambas palancas es similar y ocurre en sentido opuesto, siendo igualmente efectivo medir en cualquiera de ellas y muy fácil de saber donde se ha depositado la masa.

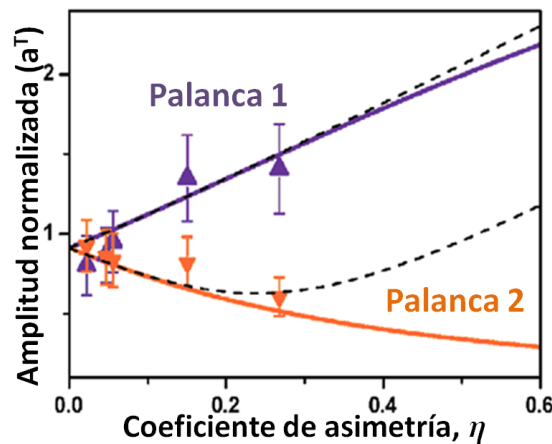


Figura 4.6. Amplitud del modo antisimétrico, normalizada a la del simétrico, en función del coeficiente de asimetría, η , para el ruido termomecánico. La línea sólida representa los cálculos numéricos basados en la teoría, la punteada la aproximación analítica y los símbolos datos experimentales.

La figura 4.7 muestra nuevamente la relación de amplitudes frente al coeficiente de asimetría tanto teóricamente, como la aproximación a segundo orden y nuestros datos experimentales, en esta ocasión para el caso de la respuesta forzada. La concordancia de los datos experimentales es muy buena. En un principio la relación de amplitudes es nula, una vez que η deja de ser nulo ésta comienza a crecer para ambos resonadores, alcanzando un estado casi estacionario para la palanca 2, mientras que en la palanca 1 sigue creciendo prácticamente de forma lineal, por lo que en este caso la sensibilidad de ambas palancas no es la misma. Además, si comparamos las figuras 4.7 y 4.8, podemos ver que la medida de la respuesta ante fuerzas externas de la palanca inactiva posee un rango de detección sin pérdida de sensibilidad mayor, lo que permitirá que los dispositivos sigan siendo útiles pese a tener grandes diferencias iniciales[8].

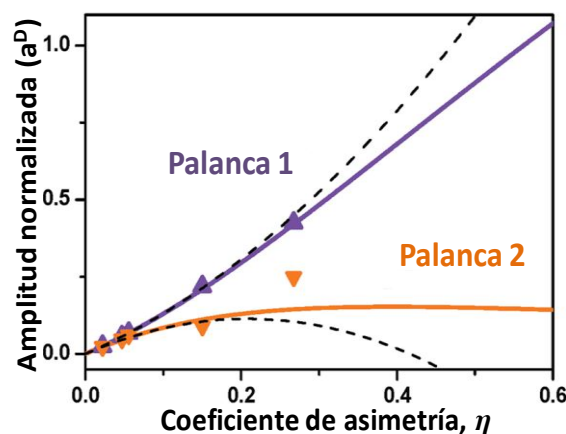


Figura 4.7. Amplitud del modo antisimétrico, normalizada a la del simétrico, en función del coeficiente de asimetría, η , para la respuesta ante fuerzas externas. La línea sólida representa los cálculos numéricos basados en la teoría, la punteada la aproximación analítica y los símbolos datos experimentales.

4.3. LÍMITE DE DETECCIÓN EN MASA

Por último analizamos el límite termomecánico de detección en masa para sistemas acoplados, así como el límite experimental. Como vimos en la sección 1.5, el límite termomecánico de detección representa la mínima masa detectable suponiendo que la incertidumbre de nuestra medida está determinada por el ruido termomecánico[9]. Pese a no ser del todo realista, ya que la mayoría de los sistemas presentan fuentes de ruido que afectan en mayor medida, como cambios en la temperatura o el ruido eléctrico, el límite termomecánico de detección representa el límite fundamental de detección. Haciendo un tratamiento análogo al llevado a cabo en la sección 1.5 para resonadores individuales, es decir, teniendo en cuenta la amplitud de oscilación debida al ruido termomecánico y la variación de la amplitud de oscilación forzada ante una masa añadida, obtenemos el límite termomecánico de detección en función de la diferencia relativa en masa entre ambos resonadores, figura 4.8. La constante de acoplamiento utilizada fue $\kappa = 0.1$ y se ha supuesto una fuerza de $F_0=1$ pN y un ancho de banda $B=1$ Hz. Como se podía prever por los resultados obtenidos durante el capítulo, el límite termomecánico de detección depende del oscilador que medimos. El resonador inactivo permite detectar masas menores y presenta un mayor rango dinámico sin sufrir pérdidas de sensibilidad. Aproximadamente, los resonadores acoplados empiezan a perder sensibilidad cuando el desorden diferencial de masa es mayor que el doble del valor de la constante de acoplamiento.

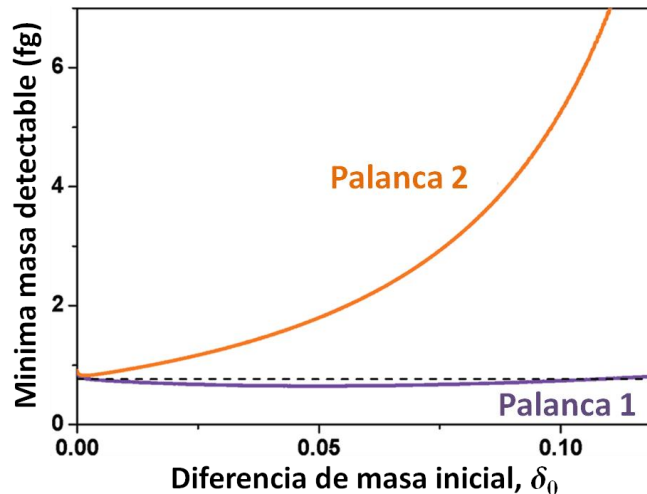


Figura 4.8. Cálculo numérico del último límite de detección en masa de un sistema de dos nanoresonadores acoplados, en función de la diferencia de masa relativa entre ellos. La constante de acoplamiento es de 0,1. En un principio, ambas palancas tienen el mismo límite, pero conforme se van diferenciando, la palanca activa pierde sensibilidad, mientras que la palanca inactiva la mantiene constante, hasta que se diferencian demasiado.

Cuando el desorden es nulo, el límite fundamental de detección de masa, para resonadores acoplados, se expresa como

$$\Delta m_{min} \approx m_0 \sqrt{4 \frac{E_{th}}{E_c} \frac{B}{Q \cdot \omega_0} \frac{2Q \cdot \kappa}{1+2\kappa}} \quad (4.17)$$

Comparándolo con la expresión obtenida para el oscilador armónico simple, ecuación (1.62), vemos que difieren en un factor $\sim 2Q\kappa$. Por lo que, los resonadores acoplados son más sensibles que un oscilador simple, si la constante de acoplamiento es menor que el inverso del doble del factor de calidad. Lo que ocurre, es que cuando se cumple esta condición, difícilmente podemos distinguir ambos modos de oscilación porque los espectros se solapan. Un criterio que establece cuando dos lorencianas son distinguibles, es que la separación en frecuencia tiene que ser mayor que la anchura a media altura, y por tanto, $\kappa_{min} \cong 1/Q$. Lo que haría que la mínima masa detectable en resonadores acoplados sea la mitad que para resonadores simples. Pero, si tenemos en cuenta que la palanca pasiva no disminuye significativamente su sensibilidad hasta que $\delta \geq 2\kappa$, se puede tener palancas acopladas que cumplan, $\kappa < 1/2Q$, siendo sus picos distinguibles en algún punto para el que, $0 < \delta < 2\kappa$. En ese rango los resonadores acoplados tendrían un último límite de detección más bajo que los individuales.

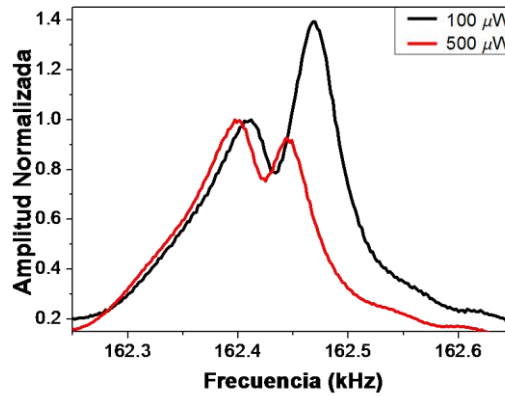


Figura 4.9. Espectro de la respuesta ante fuerzas externas de dos resonadores acoplados para dos potencias de laser distintas. El aumento de temperatura debido a la absorción de potencia, reduce la constante elástica de la palanca sobre la que se mide y por tanto disminuye su frecuencia, localizando el modo simétrico. El dispositivo es tal que su constante de acoplamiento cumple $\kappa < 1/Q$ y $0 < \eta < 0.5$.

La figura 4.9 muestra el espectro de un sistema que presenta una constante de acoplamiento de $1 \cdot 10^{-4}$ mientras que su factor de calidad es 3000. Este dispositivo se encuentra en ese límite $\kappa < 1/2Q$, y por tanto, teóricamente podría mejorar el último límite de detección de un resonador individual. Se puede observar como el simple hecho de aumentar la potencia del laser cambia la localización de los modos. La palanca iluminada localiza en mayor medida el modo simétrico cuando la potencia del laser aumenta, ya que su frecuencia de resonancia baja debido al calentamiento de la misma y su disminución del modulo de Young. El cambio total en frecuencia es del 0.02 %, mientras el cambio relativo de amplitudes se encuentra en torno al 50 %. Teniendo en cuenta diferentes medidas,

estimamos el ruido en frecuencia en torno al 0.003 % y el de amplitudes en torno al 2 %. Por tanto, la medida del cambio en amplitudes se encuentra 25 veces por encima del ruido, mientras la de cambios en frecuencia solamente 7 veces, y podemos afirmar que este dispositivo presenta un límite de detección más bajo a medidas de localización y por tanto es más sensible que un resonador individual equivalente.

De todos modos, el objetivo de los resonadores acoplados no tiene porqué ser el conseguir tener un límite termomecánico de detección menor que el de un resonador individual, ya que su mayor virtud es su selectividad. El límite termomecánico se calcula suponiendo que no hay otras fuentes de ruido, a parte del ruido termomecánico, y como ya anticipamos esto no es del todo realista. Los resonadores acoplados poseen una extraordinaria capacidad de no ver alterada la localización de los modos ni a lo largo del tiempo, ni debido a cambios en el medio que los rodea, como temperatura, presión o humedad, ni incluso introduciéndolos en otro medio[10]. Este hecho es de gran utilidad en la detección *ex situ* de cualquier tipo de partícula, ya que una de las mayores fuentes de ruido son las adsorciones inespecíficas de partículas en la superficie de las palancas, lo que provoca cambios no deseados en la frecuencia de resonancia.

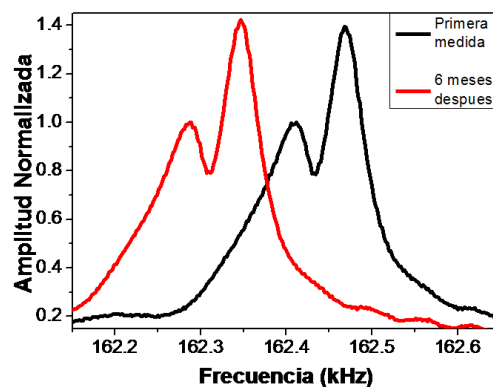


Figura 4.10. Comparación de la respuesta forzada de dos resonadores acoplados, pasado medio año. Su estado de acoplamiento se mantiene inalterado.

La figura 4.10 muestra la comparación de la respuesta ante una fuerza externa del anterior dispositivo con el paso del tiempo. La frecuencia de resonancia se ha visto alterada en un 0.1%, probablemente debido a cambios en la temperatura o humedad de las condiciones ambientales, o a la oxidación o corrosión de las palancas. Tanto la relación en amplitudes como la frecuencia relativa no varían, indicando que lo que haya sucedido, ha alterado ambas palancas por igual. Este mismo resultado lo obtenemos cuando introducimos los resonadores en un medio líquido. Adsorciones inespecíficas sobre la superficie de los resonadores modifican de forma notable sus frecuencias de resonancia, limitando su sensibilidad. El límite de detección de las medidas en frecuencias se ve reducido en más de 2 órdenes de magnitud mientras que en medidas de localización, bien sea a través de medidas de amplitud o de frecuencia relativa, se mantiene inalterado.

4.4. CONCLUSIONES

Durante estos dos capítulos hemos desarrollado un nuevo paradigma para la detección ultrasensible de masa basado en la localización de los modos de oscilación de nanoresonadores acoplados. La caracterización de la constante de acoplamiento en función de las dimensiones de las palancas y la membrana que las une, nos ha permitido diseñar resonadores con el acoplamiento óptimo para futuras aplicaciones. Los resultados experimentales nos mostraron como el acoplamiento disminuía exponencialmente a medida que la separación entre estos aumentaba, lo que atribuimos a la absorción de la onda mecanoacústica a lo largo de la membrana. Estos resultados fueron confirmados con simulaciones por elementos finitos. Además, en el apéndice A, se demuestra que el acoplamiento esta relacionado con la energía transmitida por la palanca a lo largo de la membrana y por tanto aumenta de forma cuadrática con la relación entre la longitud de la membrana y la palanca. También vimos que tanto el módulo de Young como la densidad no influyen en el acoplamiento, mientras el módulo de Poisson sí. Hemos tratado de establecer una fórmula que ayude a diseñar los dispositivos acoplados y aunque se han establecido determinadas relaciones, no se ha logrado establecer una fórmula definitiva, debido a ser un problema muy complejo sin solución analítica.

Durante el presente trabajo se han utilizado nanoresonadores acoplados de masas efectivas de 17 pg, más de 3 órdenes de magnitud menores que en anteriores estudios, lo que ha hecho posible la detección de masas del orden de centenas de femtogramos. Hasta este momento no se habían realizado experimentos con resonadores acoplados tan pequeños, debido a la dificultad de fabricar resonadores idénticos de esas dimensiones. Con ellos hemos demostrado el aumento de la sensibilidad en medidas de localización de los modos conforme disminuye la constante de acoplamiento.

Por otro lado, hemos estudiado las diferencias que existen cuando trabajamos con este tipo de dispositivos en medidas de su respuesta a fuerzas externas y el ruido termomecánico. Hemos visto como el ruido termomecánico nos proporciona información más precisa sobre la localización de la masa, mientras que la respuesta forzada tiene un rango dinámico más amplio, lo que permite trabajar con palancas acopladas que presenten desordenes iniciales mayores.

Comparando el límite termomecánico de detección de estos dispositivos con los resonadores individuales, hemos visto que pueden llegar a ser más sensibles siempre que $\kappa < 1/2Q$, pero hay que tener en cuenta que en ese caso las resonancias son indistinguibles y por tanto, no parece que sea muy eficiente. De todos modos, hemos mostrado un dispositivo que si podría superar los límites de detección de un resonador individual. Además, cabe destacar que la principal ventaja de estos dispositivos es su capacidad de discernir entre la detección específica e inespecífica mediante medidas combinadas de la localización de los modos y de los cambios en frecuencia. Esto los hace aún más interesantes sobretudo en aplicaciones ex-situ, donde el límite de detección viene impuesto por cambios térmicos o adsorciones inespecíficas.

4.5. TRABAJO FUTURO

El estudio del comportamiento de los sistemas acoplados y su aplicación a la detección de agentes biológicos seguirá siendo uno de los temas de interés del laboratorio de bionanomecánica. A continuación resumimos brevemente cuales serán los focos de interés en los próximos años.

4.5.1. Detección de proteínas y ADN

La aplicación de resonadores acoplados a la detección de agentes biológicos se presenta como uno de los retos con mayor interés en un futuro próximo. Uno de los mayores problemas que presentan estos dispositivos en esta aplicación, es la dificultad de funcionalizar de forma diferente cada uno de ellos, ya que se encuentran muy próximos entre sí. Tras descartar la funcionalización por goteo, debido al pequeño tamaño de nuestros dispositivos, consideramos que la funcionalización mediante microcapilares sería la mejor opción[11]. Se fabricaron resonadores acoplados con las dimensiones óptimas para su uso con los microcapilares más pequeños del mercado. Para el cálculo de esas dimensiones hubo que tener en cuenta tanto las dimensiones de los capilares y su separación, como el acoplamiento deseado para el dispositivo. La figura 4.11 muestra de forma esquemática el sistema experimental diseñado para funcionalizar los dispositivos.

Estos dispositivos se usarán para la detección de proteínas y de ADN mediante la técnica de etiquetado por masas secundarias[12].

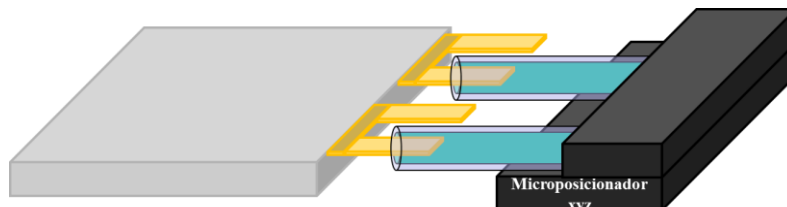


Figura 4.11. Esquema del sistema experimental usado para funcionalizar resonadores de sistemas acoplados de forma individual. Solo se funcionaliza uno de los resonadores de cada sistema acoplado cada vez. El líquido utilizado en cada capilar puede ser distinto.

4.5.2. Resonadores acoplados con microcanales

Como se ha mencionado en numerosas ocasiones, una de las mayores dificultades que presentan los resonadores en su aplicación como sensores biológicos, es la drástica disminución del factor de calidad en medios líquidos, y por tanto de su sensibilidad. En los últimos años se ha desarrollado un nuevo método de medida para solventar este problema [13, 14]. El método consiste en introducir el líquido por dentro del resonador y no alrededor de éste. De esta manera el factor de calidad prácticamente no se ve alterado y los resonadores continúan teniendo la misma sensibilidad pese a estar trabajando con un medio líquido.

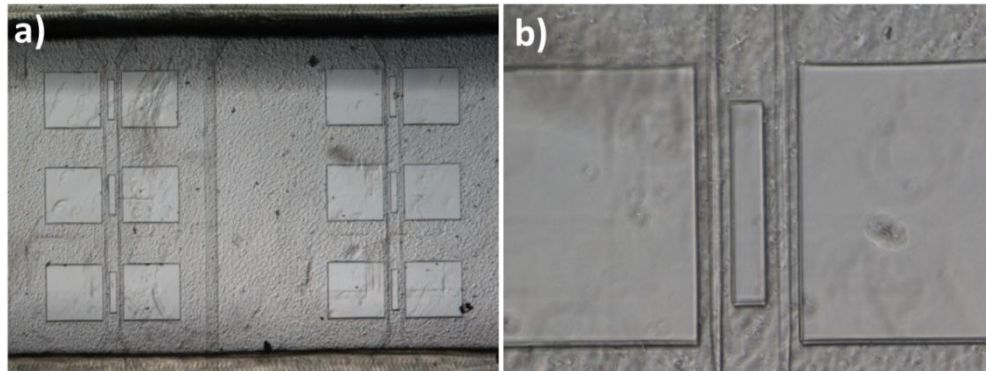


Figura 4.12. Imágenes de microscopio de uno de los dispositivos de resonadores acoplados con microcanales fabricados en Zaragoza.

En colaboración con el Doctor Martínez de la Fuente, de la Universidad de Zaragoza, se han fabricado dispositivos acoplados con microcanales integrados que se emplearán en una primera fase para la medida de densidad de líquidos y posteriormente a la detección de micropartículas, figura 4.12.

4.5.3. Estudio de múltiples resonadores acoplados

En cuanto a los fundamentos de los resonadores acoplados, ampliaremos nuestro trabajo al estudio de múltiples resonadores. Durante una estancia en la Universidad Técnica de Dinamarca (DTU) en colaboración con el Doctor Zachary Davis, se han fabricado dispositivos en los que variamos el número de resonadores acoplados. La figura 4.13 muestra la respuesta ante el ruido termomecánico de un sistema de tres resonadores acoplados e imágenes de diferentes dispositivos. Observamos como el modo central se acerca más a la frecuencia del tercero que a la del primero, lo que indica que el acoplamiento entre las palancas de los extremos no es despreciable. Otra peculiaridad de estos dispositivos es que la palanca central no oscila en ese modo, lo que conlleva que estos dispositivos pueden alcanzar un límite termodinámico de detección sin precedentes.

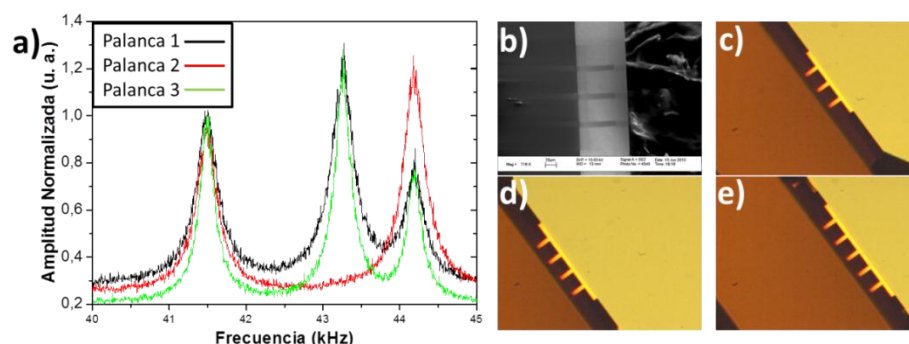


Figura 4.13. a) Espectros del ruido termomecánico de un sistema de tres resonadores acoplados, en cada una de las palancas. b) Imagen de SEM, c) imagen de microscopio del dispositivo. d) y e) Imágenes de dispositivos de 4 y 5 resonadores respectivamente.

REFERENCIAS

1. Olkhovets, A., Evoy, S., Carr, D.W., Parpia, J.M., Craighead, H.G. "*Actuation and internal friction of torsional nanomechanical silicon resonators*" Journal of Vacuum Science & Technology B, **18**, 6 (2000).
2. Karabalin, R.B., Cross, M.C., Roukes, M.L. "*Nonlinear dynamics and chaos in two coupled nanomechanical resonators*" Physical Review B, **79**, 16 (2009).
3. Spletzer, M., Raman, A., Sumali, H., Sullivan, J.P. "*Highly sensitive mass detection and identification using vibration localization in coupled microcantilever arrays*" Applied Physics Letters, **92**, 11 (2008).
4. Spletzer, M., Raman, A., Wu, A.Q., Xu, X., Reifenberger, R. "*Ultrasensitive mass sensing using mode localization in coupled microcantilevers*" Applied Physics Letters, **88**, 25 (2006).
5. Cleland, A.N., Roukes, M.L. "*Noise processes in nanomechanical resonators*" Journal of Applied Physics, **92**, 5 (2002).
6. de Groot, S.R., Mazur, P. "*NON-EQUILIBRIUM THERMODYNAMICS*" Dover: New York, **Chapter 8.4**, (1984).
7. Huber, T.M., Abell, B.C., Mellema, D.C., Spletzer, M., Raman, A. "*Mode-selective noncontact excitation of microcantilevers and microcantilever arrays in air using the ultrasound radiation force*" Applied Physics Letters, **97**, 21 (2010).
8. Gil-Santos, E., Ramos, D., Jana, A., Calleja, M., Raman, A., Tamayo, J. "*Mass Sensing Based on Deterministic and Stochastic Responses of Elastically Coupled Nanocantilevers*" Nano Letters, **9**, 12 (2009).
9. Ekinici, K.L., Yang, Y.T., Roukes, M.L. "*Ultimate limits to inertial mass sensing based upon nanoelectromechanical systems*" Journal of Applied Physics, **95**, 5 (2004).
10. Thiruvengatanathan, P., Yan, J., Seshia, A.A. "*Common mode rejection in electrically coupled MEMS resonators utilizing mode localization for sensor applications*" 2009 Joint Meeting of the European Frequency and Time Forum and the Ieee International Frequency Control Symposium.
11. Bietsch, A., Zhang, J.Y., Hegner, M., Lang, H.P., Gerber, C. "*Rapid functionalization of cantilever array sensors by inkjet printing*" Nanotechnology, **15**, 8 (2004).
12. Varshney, M., Waggoner, P.S., Tan, C.P., Aubin, K., Montagna, R.A., Craighead, H.G. "*Prion protein detection using nanomechanical resonator arrays and secondary mass labeling*" Analytical Chemistry, **80**, 6 (2008).
13. Agache, V., Blanco-Gomez, G., Cochet, M., Caillat, P. "*Suspended nanochannel in mems plate resonator for mass sensing in liquid*" 2011 Ieee 24th International Conference on Micro Electro Mechanical Systems.
14. Burg, T.P., Godin, M., Knudsen, S.M., Shen, W., Carlson, G., Foster, J.S., Babcock, K., Manalis, S.R. "*Weighing of biomolecules, single cells and single nanoparticles in fluid*" Nature, **446**, 7139 (2007).

Capítulo 5

Espectroscopía de masa y rigidez basada en nanoresonadores unidimensionales

Los próximos dos capítulos se centran en el estudio de las propiedades de los nanoresonadores unidimensionales, y en particular de los nanohilos de silicio, en su aplicación como sensores de masa.

En este primer capítulo, introduciremos los nanoresonadores unidimensional y en concreto, la degeneración de los modos flexurales de vibración que tiene lugar en dispositivos que presentan simetría axial, así como su ruptura cuando se introducen asimetrías. La ruptura de la degeneración provoca la aparición de dos modos ortogonales de vibración a frecuencias muy cercanas lo que junto con sus dimensiones nanométricas, hace que estos dispositivos presenten nuevas capacidades en su aplicación como sensores, como es su sensibilidad tanto a la rigidez mecánica como a la orientación de las partículas adsorbidas.

Tras caracterizar nuestros dispositivos y en particular su simetría, introduciremos el formalismo de Ritz basado en la teoría de elasticidad lineal bidimensional para pequeñas deformaciones. Este nos servirá para predecir el comportamiento de los nanohilos ante una deposición y nos mostrará dos nuevos paradigmas para la detección: la ruptura de la degeneración y la rotación de los planos de vibración. Además, la teoría muestra que la medida de las frecuencias de resonancia y de la orientación de los planos de oscilación permite determinar la masa, la rigidez y la posición acimutal de las partículas adsorbidas.

Por último, aplicando la técnica de deposición de carbono por haz de electrones probaremos experimentalmente estos nuevos paradigmas, así como las capacidades de estos como sensores de masa y de rigidez mecánica.

5.1. INTRODUCCION A LOS NANORESONADORES UNIDIMENSIONALES

En los últimos años, los nanoresonadores unidimensionales como nanohilos de silicio[1] y de otros materiales[2-4], o nanotubos de carbono[5-7], han emergido como candidatos prometedores para la detección ultrasensible de masa[8-12]. En particular, los nanohilos de silicio destacan por su capacidad para ser integrados en microestructuras, permitiendo controlar tanto su posicionamiento como las dimensiones de los dispositivos. Además, su gran calidad estructural y su robustez en el anclado proporciona un alto factor de calidad, lo que junto con su baja masa y alta frecuencia permite alcanzar una gran sensibilidad en masa[13, 14].

Los nanoresonadores unidimensionales poseen propiedades que les confieren capacidades únicas dentro de los sensores nanomecánicos. Por un lado, las dimensiones nanométricas de su sección, comparables con los tamaños de las moléculas detectadas, provoca que los sensores no midan únicamente la masa de las partículas, sino que también detecten sus propiedades elásticas, como vimos en la sección 1.4.1[15-20]. Además, hasta ahora los resonadores fabricados por técnicas “top-down” solían tener una anchura mucho mayor que su espesor, con lo cual los modos de vibración flexural y lateral se encontraban a frecuencias muy lejanas. En cambio, la simetría axial que presentan los resonadores unidimensionales produce la degeneración de los modos flexural y lateral, es decir, que el resonador oscile con la misma amplitud y frecuencia en todos los planos que contengan su eje de simetría[21].

Analicemos de nuevo el caso de tener un resonador convencional, figura 5.1. Si en vez de considerar los movimientos en el eje z (modo flexural), consideramos los del eje y (modo lateral), de forma análoga a como obtuvimos la ecuación (1.29), la frecuencia de resonancia de los modos laterales se expresa como

$$\omega_{n_{lateral}} = \frac{W\alpha_n^2}{L^2} \sqrt{\frac{E}{12\rho}} \quad (5.1)$$

Donde hemos supuesto que la forma de los modos de es la misma que para los modos flexurales. Por tanto, la relación entre ambas frecuencias se expresa como

$$\frac{\omega_{n_{lateral}}}{\omega_{n_{flexural}}} = \frac{W}{h} \quad (5.2)$$

Las frecuencias de oscilación de los modos laterales son, en general, mucho mayores que las de los modos flexurales debido a que $W \gg h$. Por ejemplo, para el caso de tener una micropalanca comercial de dimensiones: $L \cdot W \cdot h = 300 \times 50 \times 1 \mu m^3$, la frecuencia de resonancia del modo lateral es aproximadamente 50 veces la del modo flexural. Además de tener una frecuencia más alta, la disipación de energía de los modos laterales es menor que la de los flexurales, sobretudo al encontrarse en un medio, lo que les proporciona una mayor sensibilidad en su aplicación a la detección de masa [22, 23].

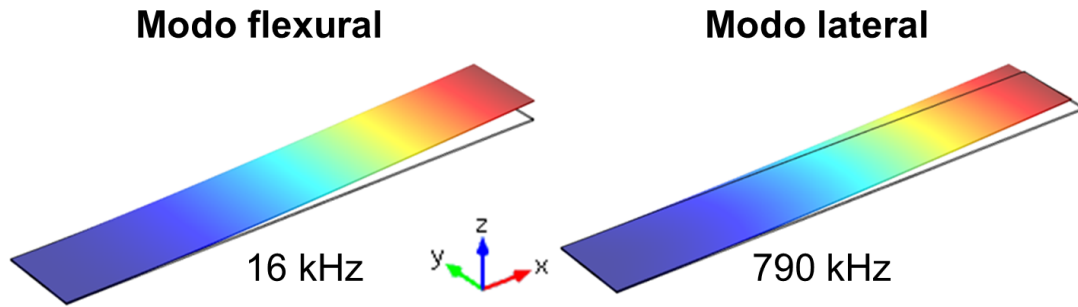


Figura 5.1 Simulación por elementos finitos de los modos flexural y lateral de una micropalanca comercial de nitruro de silicio, cuyas dimensiones son $L \cdot W \cdot t = 300 \times 50 \times 1 \mu\text{m}^3$.

En el caso de tener resonadores unidimensionales, como los nanohilos de silicio, su sección posee simetría axial lo que produce la degeneración de los modos flexurales. La frecuencia de resonancia del nanohilo sería la misma en todos los planos que contengan el eje axial, ya que el segundo momento de área será igual para todos ellos, y por tanto, vibra en todos los planos a la vez. A partir de la ecuación (1.28) y el segundo momento de área calculado para un cilindro, obtenemos su frecuencia de resonancia

$$\omega_n = \frac{R\alpha_n^2}{2L^2} \sqrt{\frac{E}{\rho}} \quad (5.3)$$

La figura 5.2 muestra una simulación de los dos primeros modos flexurales de un cilindro, ambos modos poseen la misma frecuencia y son ortogonales, lo que físicamente indica que oscila en todos los planos que contengan su eje de simetría.

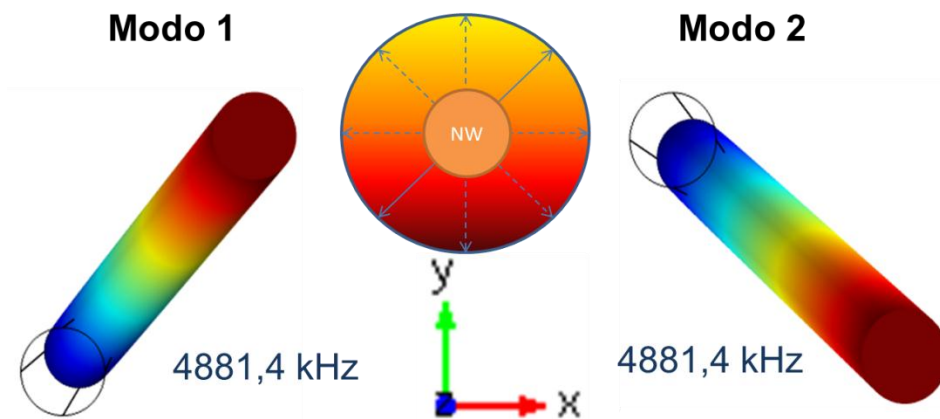


Figura 5.2. Simulación por elementos finitos de los dos primeros modos de vibración de un nanohilo de silicio de $7 \mu\text{m}$ de longitud y una sección circular de 200 nm de diametro. Ambos modos poseen la misma frecuencia de resonancia, lo que indica que el nanohilo vibra en todos los planos que contengan su eje de simetría.

Cuando estos resonadores dejan de ser perfectamente simétricos, las frecuencias de ambos modos dejan de ser idénticas y la vibración se localiza en dos planos concretos y ortogonales entre sí. Por ejemplo, en el caso de tener un cilindro elíptico, en el primer modo el cilindro oscila en la dirección del eje menor, R_{min} , mientras que en el segundo, en la del eje mayor, R_{max} , figura 5.3. El hecho de que los planos de vibración sean ortogonales entre sí, nos permitirá medir el ángulo que forman estos planos con el eje óptico.

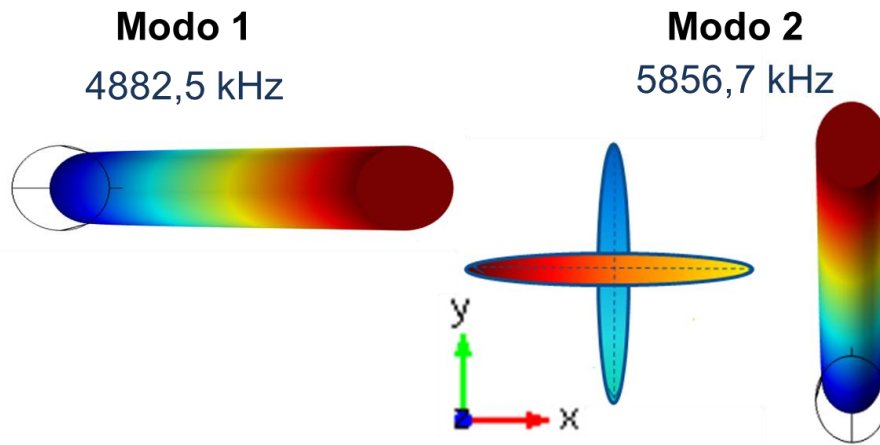


Figura 5.3. Simulación por elementos finitos de los dos primeros modos de vibración de un nanohilo de silicio de $7 \mu\text{m}$ de longitud y una sección elíptica de 100 nm radio menor (R_{min}) y 110 nm de radio mayor (R_{max}). En esta ocasión el nanohilo vibra en dos direcciones ortogonales marcadas por los ejes de la elipse y a frecuencias lejanas.

Las frecuencias de los modos de vibración de un cilindro elíptico son

$$\omega_{n_s} = \frac{R_{min}\alpha_n^2}{2L^2} \sqrt{\frac{E}{\rho}} \quad ; \quad \omega_{n_f} = \frac{R_{max}\alpha_n^2}{2L^2} \sqrt{\frac{E}{\rho}} \quad (5.4)$$

Donde ω_{n_s} se refiere al n -ésimo modo lento y ω_{n_f} al n -ésimo modo rápido. Con el fin de caracterizar la simetría de nuestros nanohilos definimos el factor de asimetría, Ω , como la diferencia relativa de las frecuencias de ambos modos, que este caso se escribe como

$$\Omega = \frac{\omega_f - \omega_s}{\omega_s} = \frac{R_{max} - R_{min}}{R_{min}} \quad (5.5)$$

Como ocurría para la constante de acoplamiento en el caso de los resonadores acoplados, el que seamos capaces de distinguir los dos modos de oscilación, es decir, que se produzca la ruptura de la degeneración, dependerá de la relación entre el factor de asimetría y el factor de calidad. Suponiendo que tengamos la misma sensibilidad en la medida de ambos modos, para distinguirlos se tendrá que cumplir, $\Omega > 1/Q$.

5.2. NANOHILOS DE SILICIO

5.2.1. Fabricación

Los nanohilos de silicio han sido fabricados en el Instituto de Microelectronica de Barcelona (IMB-CNM, CSIC) en el grupo del doctor Álvaro San Paulo. La figura 5.4 muestra los pasos del proceso de fabricación[24]:

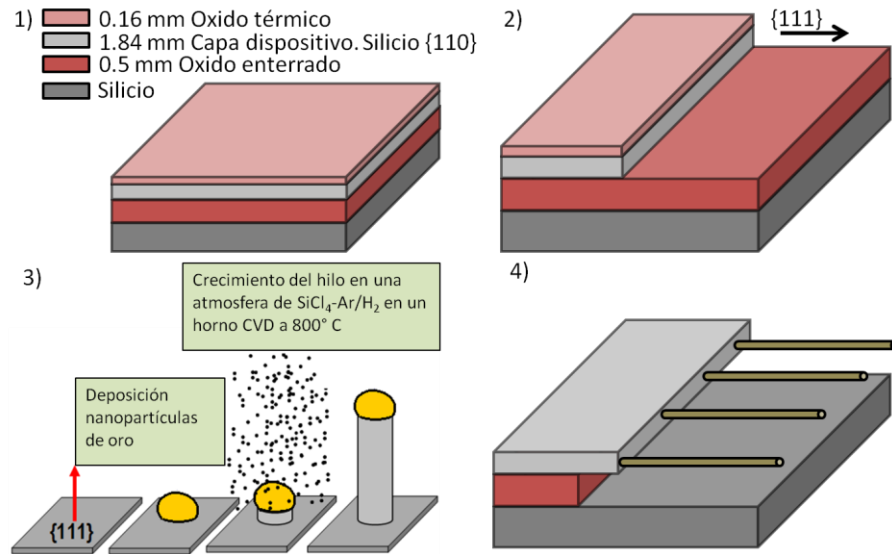


Figura 5.4. Esquema del proceso de fabricación de los nanohilos de silicio.

1. Se crece térmicamente una capa de óxido de 160 nm, sobre unas obleas de silicio (SOI), con una capa de dispositivo de $2\ \mu\text{m}$ de espesor orientada en la dirección $\langle 110 \rangle$.
2. Se crean microtrincheras con las paredes orientadas en la dirección $\langle 111 \rangle$ por fotolitografía y ataque iónico reactivo (RIE).
3. Se introduce el sustrato en una disolución de nanopartículas de oro de 80-150 nm de diámetro (British Biocell). Los nanohilos de silicio crecen mediante la técnica de deposición química en fase vapor a presión atmosférica, en un reactor a 800°C con el 10% de H_2/Ar como gas de dilución y de arrastre. Los flujos usados son de 270 y 45 s.c.c.m. (cm^3/min estándar) respectivamente. Para mantener la presión de vapor constante, el gas de carga pasa por un líquido de SiCl_4 burbujeante mantenido a 0°C .
4. La capa de óxido enterrado es atacada mediante ataques húmedos. La distancia entre el nanohilo y el sustrato se puede controlar a través del tiempo del ataque.

Los nanohilos crecen siguiendo diferentes direcciones cristalográficas y nosotros seleccionamos aquellos nanohilos axialmente orientados en la dirección $\langle 111 \rangle$, paralelos al sustrato (Figura 5.5). Su sección es hexagonal y está formada por el plano $\langle 112 \rangle$. Los nanohilos de silicio utilizados tienen una longitud entre 5 y 12 μm y un diámetro entre 100 y 300 nm.

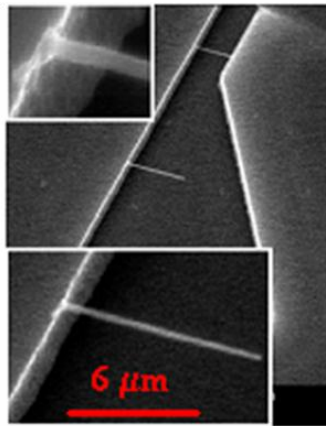


Figura 5.5. Imágenes de SEM de nuestros nanohilos de silicio a diferentes magnificaciones.

5.2.2. Caracterización óptica

En los últimos años, el estudio de la extraordinaria sensibilidad al movimiento que poseen los métodos ópticos, en estructuras con dimensiones por debajo de la longitud de onda, está siendo un tema de gran interés en el campo de los sensores nanomecánicos [25-28]. Aunque trataremos este tema con mayor profundidad en el último capítulo, es importante resaltar en este punto el por qué medimos. Como explicamos en el capítulo 2, en la caracterización de nanohilos nuestro sistema interferométrico adopta la configuración Fabry-Perot, es decir, sin espejo de referencia. En esta configuración, cuando el resonador es suficientemente ancho, mayor que la longitud de onda, parte de la luz que se transmite sufre múltiples reflexiones entre el sustrato y el resonador, por lo que se forma una cavidad Fabry-Perot. La intensidad de luz que sale de la cavidad dependerá de su longitud, es decir, de la distancia entre el resonador y el sustrato, por lo que el movimiento del resonador modificará la intensidad recogida en el fotodetector (Figura 5.6.a). En el caso de los nanoresonadores unidimensionales, como los nanohilos de silicio, las dimensiones manométricas de su sección, inferiores a media longitud de onda, disminuyen drásticamente su reflexión y deja de formarse una cavidad Fabry-Perot. No obstante, el haz incidente y el reflejado por el sustrato generan una onda estacionaria cerca de este, que interactuará con el nanohilo. Esta interacción dependerá fuertemente de la distancia a la que se encuentre el nanohilo del sustrato, por lo que de nuevo, el movimiento del nanohilo modificará la intensidad recogida por nuestro fotodetector (Figura 5.6.b).

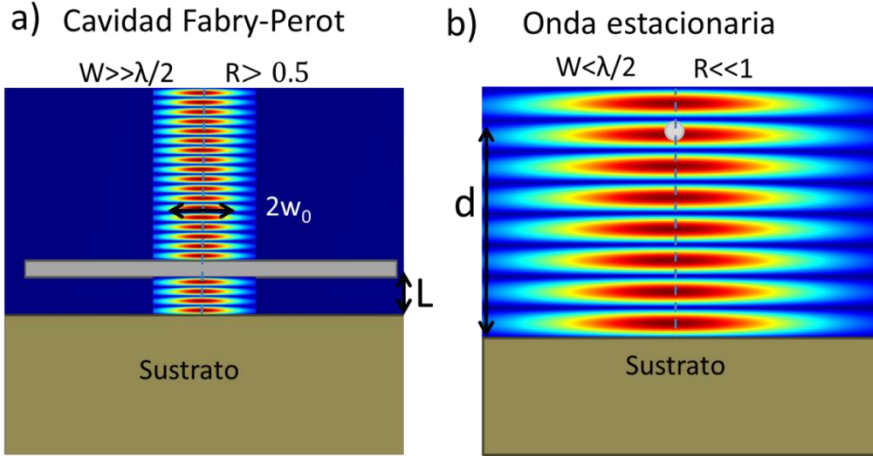


Figura 5.6. Esquema que muestra la diferencia entre una cavidad Fabry-Perot y la onda estacionaria cuando tenemos un nanohilo.

Por otro lado, en el caso de tener nuestro nanohilo centrado en el spot, teniendo este un ancho, w_0 , mayor a $1 \mu\text{m}$, y por tanto, mucho mayor que el diámetro del nanohilo, los movimientos paralelos al sustrato no son detectables. Además, si suponemos que la sensibilidad al movimiento es lineal, hecho irrefutable debido a que hablamos de movimientos del orden de Angstrom, nuestra medida será simplemente la proyección del movimiento del nanohilo en el eje óptico. Finalmente, por tratarse de movimientos ortogonales y de la misma amplitud, ya que las frecuencias son muy cercanas, a partir de la relación de las amplitudes de vibración de ambos modos medidas en nuestros sistema, obtenemos el ángulo α , que forma el eje rápido de oscilación con el eje óptico

$$\frac{A_s}{A_f} = |\tan \alpha| \quad (5.6)$$

Nótese que nuestros valores de amplitud siempre serán positivos y por tanto existirá una indeterminación en la medida del ángulo debido a que α y $-\alpha$ nos proporcionarían la misma señal. Nótese también, la importancia de medir el movimiento de estos dispositivos en ausencia de fuerzas externas, puesto que si las aplicásemos, la amplitud de oscilación de cada modo estaría determinada por la distribución espacial de las fuerzas.

La figura 5.7 muestra el espectro de ruido termomecánico para uno de nuestros nanohilos, medido en aire y en vacío. Como hemos visto, que se produzca la ruptura de la degeneración de los modos depende únicamente de la relación entre la disipación de energía y la asimetría del mismo. La medida en aire no permite resolver los dos modos de vibración, debido a que la fuerza hidrodinámica es muy alta y provoca que el factor de calidad sea bajo ($Q \approx 5$). En cambio, la medida en alto vacío (10^{-7} mbar) muestra el alto factor de calidad intrínseco que presentan los nanohilos de silicio ($Q \approx 3000$). En este caso se cumple $\Omega > 1/Q$ y por tanto se

produce la ruptura de la degeneración de los modos de vibración. El coeficiente de asimetría para este nanohilo es del 0,7 %, mientras que el ángulo que forma el eje rápido con el eje óptico es de $\pm 50^\circ$.

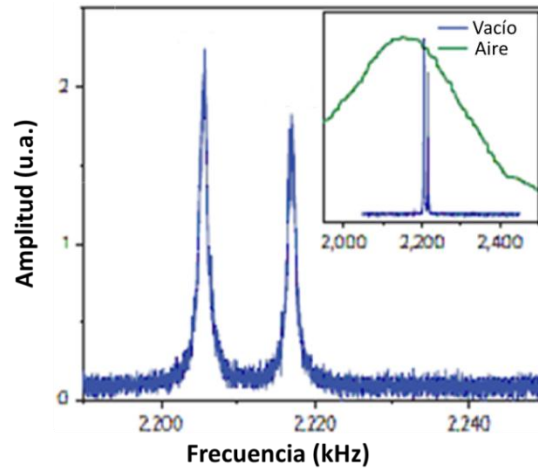


Figura 5.7. Espectro del ruido termomecánico en alto vacío de un nanohilo de $7\ \mu\text{m}$ de largo y $220\ \text{nm}$ de diámetro medido en nuestro sistema interferométrico. La separación entre las frecuencias de resonancia indican un coeficiente de asimetría del 0,7 % y a partir de las amplitudes estimamos el ángulo α de $\pm 50^\circ$. En el inset observamos como la medida en aire solo muestra un pico de resonancia y al pasar a alto vacío la disminución de la disipación de energía da lugar a la ruptura de la degeneración.

Cabe destacar la gran simetría presente en los nanohilos utilizados. Para este trabajo, hemos medido 60 nanohilos diferentes, obteniendo un factor de asimetría medio del 0.7 % y mínimo del 0.1 %, figura 5.8. Si asumimos, como anteriormente, que los nanohilos son cilindros elípticos y considerando un diámetro aproximado de $200\ \text{nm}$, esto significaría que la diferencia entre el radio mayor y el menor del cilindro es solamente $1\ \text{\AA}$.

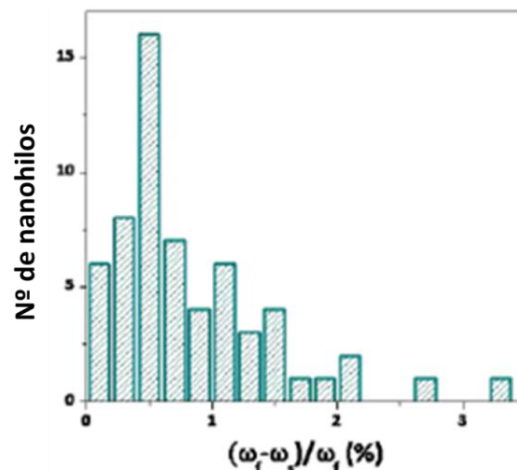


Figura 5.8. Histograma de la separación relativa entre modos observada en alto vacío para 70 nanohilos diferentes. La media se encuentra en torno al 0,7 %.

5.3. FORMALISMO DE RITZ

Para predecir los cambios en las frecuencias y en los planos de vibración que pueden producirse cuando se adsorben partículas en los nanohilos de silicio, introduciremos el formalismo de Ritz basado en la teoría de la elasticidad bidimensional para pequeñas deformaciones[29]. En esta ocasión consideraremos el eje z orientado a lo largo del nanohilo. La vibración de un modo de vibración puede escribirse como $u = u_0 \psi(z) \cos \omega t$ y $v = v_0 \psi(z) \cos \omega t$, donde u y v son las proyecciones del movimiento en el eje x e y , ψ es la forma del modo, ecuación (1.27) y u_0 y v_0 las amplitudes en los ejes arbitrarios x e y .

Al tener dos direcciones de movimiento, la energía cinética del sistema viene dada por

$$E_c = \int_0^L \frac{1}{2} \rho S [\dot{u}^2 + \dot{v}^2] dz \quad (5.7)$$

Del mismo modo, calculamos la energía potencial del sistema, $E_p = \int_0^L \frac{1}{2} \varepsilon_{ik} \sigma_{ik} dz$, teniendo en cuenta ambas direcciones del movimiento. Por tanto, en este caso, la deformación a lo largo del eje del nanohilo vendrá dada por

$$\varepsilon_z = -x \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - y \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \quad (5.8)$$

De donde se obtiene

$$E_p = \int_0^L \left[\frac{1}{2} D_{11} u''^2 + \frac{1}{2} D_{22} v''^2 - D_{12} u'' v'' \right] dz \quad (5.9)$$

donde D_{ij} son las componentes del tensor de rigidez flexural, que para un material isótropo se define como $D_{ij} = \iint [E(r_i^2 + r_j^2) \delta_{ij} - r_i r_j] dx dy$, donde δ_{ij} es la delta de Kronecker, $i, j=1, 2$ y $r_1 = x$ y $r_2 = y$. Además, hemos aplicado $(\)'' = \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

Definimos el funcional de energía del sistema, \mathcal{F} , como la diferencia entre la máxima energía potencial y cinética. De acuerdo con el método de Ritz, el problema de autovalores que se obtiene al minimizar la energía funcional con respecto a los coeficientes desconocidos u_0 y v_0 , nos proporciona las frecuencias y los planos de vibración de nuestro nanohilo. Por tanto, nuestro problema consiste en resolver el siguiente problema de autovalores

$$(\mathbf{K} - \omega^2 \mathbf{M}) \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad (5.10)$$

Donde \mathbf{K} es la matriz de rigidez, $K_{ij} = \int_0^L (D_{ij} \psi'^2) dz$ y \mathbf{M} la matriz de masa, $M_{ij} = \int_0^L (\delta_{ij} \rho S \psi^2) dz$. Obteniendo finalmente

$$\omega_S = \frac{1}{2m} \left[\text{Tr}(\mathbf{K}) - \frac{k_{xx} - k_{yy}}{\cos 2\alpha} \right] \quad (5.11)$$

$$\omega_f = \frac{1}{2m} \left[\text{Tr}(\mathbf{K}) + \frac{k_{xx} - k_{yy}}{\cos 2\alpha} \right] \quad (5.12)$$

$$\tan 2\alpha = \frac{2k_{xy}}{k_{xx} - k_{yy}} \quad (5.13)$$

siendo ω_S y ω_f las frecuencias de resonancia del modo lento y el modo rápido de oscilación y el ángulo α indica la orientación de los planos de vibración respecto a un eje arbitrario, que en nuestro caso será el eje óptico, figura 5.9.

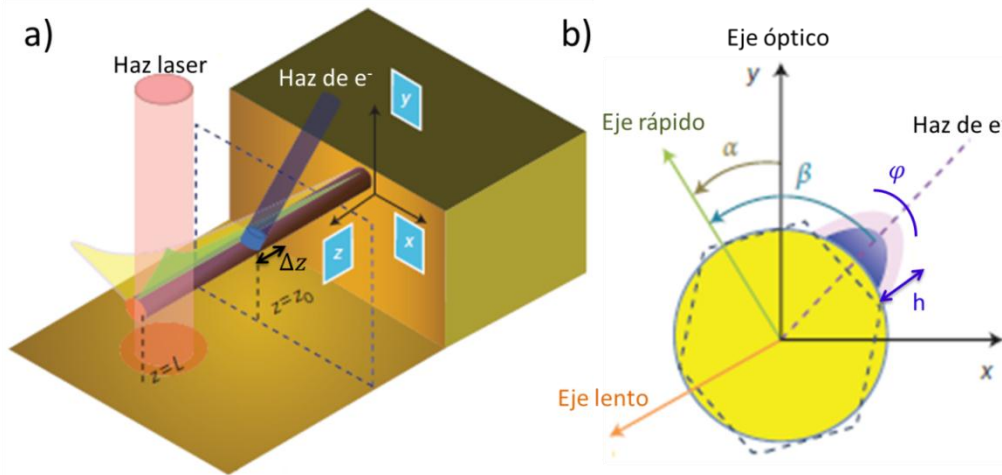


Figura 5.9 a) Esquema de un nanohilo de silicio representando los planos de vibración del primer modo flexural, el haz laser y el haz de electrones que produce la deposición de carbono. b) Esquema de la sección trasversal del nanohilos donde se definen los ángulos α , β y ϕ , así como el espesor de la masa depositada.

Llegados a este punto, vamos a analizar el efecto que provocaría una pequeña deposición, sobre las frecuencias y los planos de vibración de un nanohilo de silicio. En primer lugar, consideremos los nanohilos como cilindros elípticos cuyos planos de vibración forman un determinado ángulo α con el eje óptico y que tienen un cierto grado de asimetría Ω , ecuaciones (5.4) y (5.5). De todos modos, la masa depositada se considerará adsorbida a un cilindro circular, lo cual tiene sentido por tratarse de nanohilos con un grado de asimetría muy bajo.

La figura 5.9 muestra esquemáticamente las definiciones de los ángulos α y β , el ángulo que forma el eje óptico y la masa depositada con el eje rápido de vibración respectivamente, y de las dimensiones de la masa depositada, Δz , ϕ y h , que son respectivamente su dimensión longitudinal, acimutal y su espesor. Además, para obtener ecuaciones analíticas simples, vamos a suponer que las dimensiones de la masa depositada son mucho menores que las del nanohilo, $h \ll r$, $\phi \ll 1$, $\Delta z \ll L$ y además, que el factor de asimetría es muy bajo, $\Omega \ll 1$. Estas condiciones se suelen cumplir cuando hablamos de adsorción de átomos, moléculas o proteínas en nanohilos o nanotubos, así como en palancas axialmente simétricas.

Despreciando el desplazamiento del eje neutro y a partir de las ecuaciones (5.4), (5.5) y (5.11-13), se obtienen las nuevas frecuencias de resonancia y sus ejes de vibración. Pero más importantes que estas magnitudes serán, como siempre, sus diferencias relativas y para el caso de las frecuencias, más concretamente la suma y la diferencia de ambos modos, como veremos a continuación. Se puede demostrar que la suma y la diferencia de los cambios relativos en frecuencia de ambos modos y el cambio del ángulo de los planos de vibración vienen dados por

$$\frac{\Delta\omega_s}{\omega_s} + \frac{\Delta\omega_f}{\omega_f} = \left[-\psi(z_0)^2 \frac{\rho_D}{\rho_{NW}} + \phi(z_0)^2 \frac{E_D}{E_{NW}} \right] \frac{V_D}{V_{NW}} \quad (5.14)$$

$$\frac{\Delta\omega_f}{\omega_f} - \frac{\Delta\omega_s}{\omega_s} = \phi(z_0)^2 \frac{E_D}{E_{NW}} \frac{V_D}{V_{NW}} \cos 2\beta \quad (5.15)$$

$$\Delta\alpha = \frac{\phi(z_0)^2}{2\Omega_0} \frac{E_D}{E_{NW}} \frac{V_D}{V_{NW}} \sin 2\beta \quad (5.16)$$

donde $\phi = \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2}$ es la curvatura del modo adimensional, V el volumen, los subíndices D y NW se refieren al material depositado y al nanohilo y Ω_0 es el coeficiente de asimetría inicial.

Si nos fijamos en la expresión para la suma de los cambios relativos de frecuencia, vemos que esta es proporcional al volumen de la partícula y no depende del ángulo acimutal en el que es absorbida. Presenta dos mecanismos que actúan de forma opuesta. Por un lado, los efectos de masa disminuyen la frecuencia de resonancia y son proporcionales al cuadrado de la amplitud de oscilación en la posición donde se adsorbe la partícula, y por tanto, para el primer modo flexural de oscilación serán nulos cuando la partícula se adsorbe en el extremo fijo y máximos cuando ocurre en el extremo libre. Por el otro, los efectos de rigidez mecánica aumentan la frecuencia de resonancia y son proporcionales al cuadrado de la curvatura del modo en la posición donde se adsorbe la partícula y por tanto, para el primer modo de oscilación son nulos al producirse cerca del extremo libre y máximos en el extremo.

Para el caso de la diferencia de los cambios relativos en frecuencia, solo existe una contribución y esta se debe a efectos de rigidez. Por tratarse de efectos de rigidez, al igual que antes, son proporcionales tanto a la rigidez como al volumen relativo de la partícula, y también a la curvatura del modo al cuadrado, por lo que vuelven a ser nulos cuando la partícula se adsorbe al extremo libre y máximos cuando ocurre en el extremo fijo. Además, la diferencia de los cambios relativos en frecuencia también depende de la variación diferencial de la rigidez, es decir, de cuanto más se ve afectado uno de los modos debido a la presencia de la partícula, y por tanto, del ángulo acimutal donde se adhiere. Esto hace que la diferencia de los cambios relativos en frecuencia sea máxima cuando la deposición se realiza sobre uno de los planos de vibración y nula cuando se produce a 45° de estos, ya que afectaría de igual manera a ambos modos de oscilación.

Respecto al cambio de ángulo de los planos de vibración, la rotación, vuelve a ser un efecto de rigidez, y por tanto, proporcional al volumen y a la rigidez

relativa de la partícula, así como a la curvatura al cuadrado del modo. Además, la rotación también depende de la posición acimutal, siendo mínima cuando la deposición se produce sobre un plano de oscilación, ya que solo afecta a un modo, y máxima cuando ocurre a 45° , rotando el eje rápido de oscilación hacia este plano. Cabe destacar el hecho de que la rotación de los planos es inversamente proporcional al factor de asimetría. Como es lógico, los resonadores con un alto grado de asimetría, como las palancas usuales no rotan sus planos de oscilación y por tanto, necesitamos resonadores con un alto grado de simetría axial, como nuestros nanohilos de silicio, para ver estos efectos.

Las posibilidades que ofrecen el seguimiento de estas tres magnitudes son únicas entre los sensores nanomecánicos. El único parámetro que haría falta conocer para determinar la masa, rigidez y posición acimutal de una partícula a través de la medida de estas tres magnitudes sería la posición a lo largo del nanohilo, y esta se puede determinar fácilmente a través del seguimiento de los modos superiores de oscilación.

Veamos hasta que punto es útil la medida de estas magnitudes. En primer lugar, combinando las ecuaciones (5.15) y (5.16) obtenemos la expresión para el ángulo acimutal donde se adhiere la partícula

$$\tan 2\beta = \phi(z_0)^4 2\Omega_0 \Delta\alpha / \left(\frac{\Delta\omega_f}{\omega_f} - \frac{\Delta\omega_s}{\omega_s} \right) \quad (5.17)$$

Por tanto, a partir de la diferencia de los cambios relativos en frecuencia, la rotación, la posición longitudinal y el factor de asimetría inicial se puede determinar el ángulo de adsorción. Por primera vez, un resonador nanomecánico se muestra como un sensor direccional. Si sabemos la posición longitudinal de la partícula obtenemos el módulo de Young de esta o más bien la rigidez efectiva, $E_D V_D$, utilizando la ecuación (5.15). Finalmente, a partir de la suma de los cambios relativos en frecuencia y sabiendo tanto la rigidez efectiva como la posición de la partícula, se determina su masa a partir de la ecuación (5.14). Si sabemos su densidad sabemos su volumen y por tanto su módulo de Young.

Existen casos particulares y muy interesantes que simplifican las ecuaciones (5.14-16). En cuanto a la posición longitudinal, si la partícula se deposita en el extremo libre solo la suma de los cambios relativos en frecuencia no será nula y de ella obtendremos directamente la masa de la partícula

$$\frac{\Delta\omega_s}{\omega_s} + \frac{\Delta\omega_f}{\omega_f} = -\psi(z_0)^2 \frac{m_D}{m_{NW}} \quad (5.18)$$

Por otro lado, si la adsorción se produce en el extremo fijo la suma solo dependerá de los efectos de rigidez y de ella obtendremos directamente la rigidez efectiva

$$\frac{\Delta\omega_s}{\omega_s} + \frac{\Delta\omega_f}{\omega_f} = \left[\phi(z_0)^2 \frac{E_D}{E_{NW}} \right] \frac{V_D}{V_{NW}} \quad (5.19)$$

Además la relación entre la diferencia y la suma nos dará la posición acimutal de la partícula

$$\cos 2\beta = \left(\frac{\Delta\omega_f}{\omega_f} - \frac{\Delta\omega_s}{\omega_s} \right) / \left(\frac{\Delta\omega_s}{\omega_s} + \frac{\Delta\omega_f}{\omega_f} \right) \quad (5.20)$$

La figura 5.10 muestra el espectro de ruido térmico antes y después de la adsorción de carbono en el extremo libre y en el extremo fijo de un nanohilo. Cuando la adsorción sucede en el extremo libre, la suma del cambio relativo en frecuencias es negativa y está relacionada directamente con la masa de la partícula depositada, siendo $m_D = 3$ fg, además la diferencia es nula. Al depositar sobre el extremo fijo, la suma será positiva, la diferencia será máxima y ambas estarán relacionadas con la rigidez de la partícula. A partir de la ecuación (5.20) calculamos la posición acimutal donde se adsorció la partícula, $\beta = 60^\circ$.

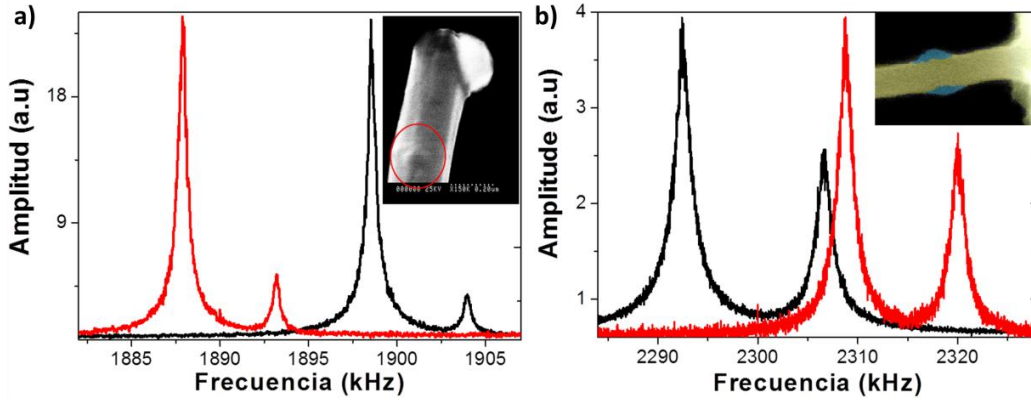


Figura 5.10. Espectro del ruido termomecánico antes y después de la adsorción de carbono: a) en el extremo libre y b) en el extremo fijo, de un nanohilo de silicio. En el primer caso las ambas frecuencias disminuyen por igual mientras que en el segundo, ambas aumentan pero una más que otra. Los insets muestran imágenes de SEM del carbono amorfo depositado sobre los nanohilos.

Respecto a la posición acimutal, si la adsorción se produce sobre uno de los planos de oscilación, la diferencia de los cambios relativos en frecuencia será una medida directa de los efectos de rigidez totales y la rotación será nula. En el caso contrario, en el que la adsorción se produzca a 45° de los planos de vibración, la rotación será una medida directa de los efectos de rigidez totales y la diferencia será nula

$$\beta = 0^\circ \quad \frac{\Delta\omega_f}{\omega_f} - \frac{\Delta\omega_s}{\omega_s} = \phi(z_0)^2 \frac{E_D}{E_{NW}} \frac{V_D}{V_{NW}} \quad ; \quad \Delta\alpha = 0 \quad (5.21)$$

$$\beta = 45^\circ \quad \Delta\alpha = \frac{\phi(z_0)^2}{2\Omega_0} \frac{E_D}{E_{NW}} \frac{V_D}{V_{NW}} \quad ; \quad \frac{\Delta\omega_f}{\omega_f} - \frac{\Delta\omega_s}{\omega_s} = 0 \quad (5.22)$$

Ambos métodos nos permitirían de forma muy sencilla desacoplar los efectos de masa y rigidez producidos por la partícula, teniendo en cuenta la ecuación (5.14).

5.4. DETECCION Y CARACTERIZACIÓN DE CARBONO

A continuación, utilizando la técnica de deposición de carbono por haz de electrones, demostraremos experimentalmente tanto la ruptura de la degeneración de los modos de vibración, como la rotación de los planos de oscilación, debidas a la adsorción de partículas sobre el nanohilo. Además, determinaremos la densidad y el modulo de Young del carbono amorfo depositado, gracias a la capacidad que tienen estos dispositivos para desacoplar los efectos de masa y rigidez. Como ya comentamos en el capítulo 2, la deposición de carbono por haz de electrones nos permite depositar partículas sobre nuestros nanohilos con una precisión de decenas de nanómetros y además permite girar el ángulo de la muestra hasta $\pm 45^\circ$, por lo que podemos focalizar el haz de electrones tanto sobre los planos de vibración como fuera de ellos.

5.4.1. Ruptura de la degeneración de los modos de vibración

El excelente grado de simetría presente en los nanohilos de silicio, nos permite plantearnos una nueva manera de detectar partículas. Esta consiste en monitorizar la ruptura de la degeneración causada por la llegada de estas. De esta forma pasaremos, de forma abrupta, de tener una resonancia en el espectro de ruido termomecánico a tener dos, además, el ángulo que formen los planos de vibración nos dirá directamente, donde ha llegado la partícula. Puesto que la ruptura de la degeneración, se produce por efectos de rigidez, para que sea eficiente, la partícula tiene que ser adsorbida cerca del extremo fijo.

Lo primero que haremos, será elegir uno de los nanohilos que presenta un grado de asimetría más bajo. Lo primero que hacemos es determinar las direcciones de los planos de vibración a partir de la relación de las amplitudes de oscilación de ambos modos, ecuación (5.4). Mediante deposiciones controladas de carbono amorfo sobre el eje lento y cerca del extremo fijo, lo que lo hará cada vez más rígido, aumentando su frecuencia. Finalmente, igualamos las frecuencias de ambos modos dando lugar a la degeneración de los modos de vibración. Nótese, que debido a la indeterminación en la medida del ángulo, ecuación (5.4), puede ocurrir que durante la deposición de carbono ambas frecuencias sufran cambios, en ese caso, nos habremos equivocado de ángulo y no estaremos depositando sobre uno de los ejes de vibración, por tanto, tendremos que cambiar al ángulo opuesto. Este paso es necesario, debido a que la mayoría de los nanohilos presentan dos modos de oscilación distinguibles, pese a su gran calidad estructural. Además, en un principio, no podemos distinguir entre un nanohilo con sus modos de vibración degenerados y uno que tenga sus planos de vibración paralelos al eje óptico y al sustrato, ya que en ambos casos observaríamos una única resonancia en el espectro. Una vez tenemos un nanohilo con los modos degenerados en alto vacío, focalizamos nuevamente el haz de electrones en el extremo fijo del nanohilo, en esta ocasión a 15° del eje óptico. La figura 5.11 muestra el espectro de ruido termomecánico antes y después de la adsorción de carbono.

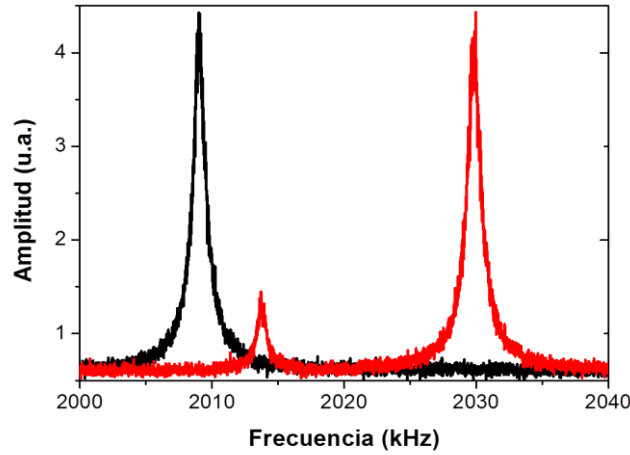


Figura 5.11. Espectro del ruido termomecánico antes y después de la adsorción de carbono en el extremo fijo de un nanohilo de silicio que inicialmente presenta degeneración de los modos de oscilación. Una vez adsorbidas el carbono, la degeneración se rompe y el nanohilo oscila en dos planos ortogonales, coincidiendo el plano rápido de oscilación, con la dirección donde se deposita el carbono.

La adsorción de carbono rompe la degeneración de los modos y fija sus planos de oscilación con el eje rápido situado en la dirección donde se adsorbe el carbono. A partir de la amplitud de los picos podemos calcular de nuevo los ángulos de vibración, y por tanto, la posición acimutal de adsorción, $\alpha = \beta = 16 \pm 2^\circ$. La mínima masa detectable por este método dependerá del módulo de Young de la partícula, ya que es debido a efectos de rigidez. Por tanto, será más correcto hablar de mínima rigidez efectiva detectable, $E_{D_{min}} V_{D_{min}}$, siendo aquella que provoque un cambio en frecuencia suficiente para que se empiecen a distinguir ambos modos, es decir, $\Omega > 1/Q$. A partir de la ecuación (5.15) obtenemos

$$E_{D_{min}} V_{D_{min}} = \frac{E_{NW} V_{NW}}{Q \phi(0)^2} \quad (5.23)$$

5.4.2. Rotación de los planos de vibración

Otra de las posibilidades que nos ofrecen los nanohilos de silicio, debido a su alto grado de simetría, es la detección de partículas mediante la medida de la rotación de los planos de vibración. Como vimos anteriormente, la rotación es inversamente proporcional al factor de asimetría, por lo que de nuevo elegiremos uno de los nanohilos con menor Ω_0 . A partir de la amplitud relativa de los modos, determinamos que el modo rápido oscila a 17° o a -17° , respecto al eje óptico. Para resolver esta indeterminación realizamos una pequeña deposición cerca del extremo fijo a -45° respecto del eje óptico y observamos que la frecuencia de resonancia del modo rápido cambia en mayor medida que la frecuencia del modo lento, determinándose que $\alpha = (-17 \pm 2)^\circ$.

Una vez caracterizado el estado inicial de nuestro nanohilo, realizaremos deposiciones sucesivas sobre este fijando la posición, cerca del extremo fijo, el ángulo, 45° respecto del eje óptico, y la masa, previamente calibrada en un nanohilos similar mediante deposiciones en el extremo libre y aproximadamente igual a 200 attogramos. La figura 5.12.a muestra el espectro de ruido térmico, cada 2 de estas deposiciones. Ambas frecuencias crecen, debido a que estamos aumentando la rigidez del nanohilo. En un principio, el factor de asimetría decrece, debido a que la adsorción se produce más cerca del modo lento, pero una vez que los ejes de vibración han rotado lo suficiente. Siendo $\alpha > 0$, Ω crece cada vez más, debido a que ahora depositamos más cerca del eje rápido. En cuanto a las amplitudes relativas de ambos picos, estas varían claramente a medida que se adhiere más carbono, rotando los planos de vibración hasta que el plano rápido se alinea con la posición acimutal de las partículas y pasa a ser el único afectado por la deposición.

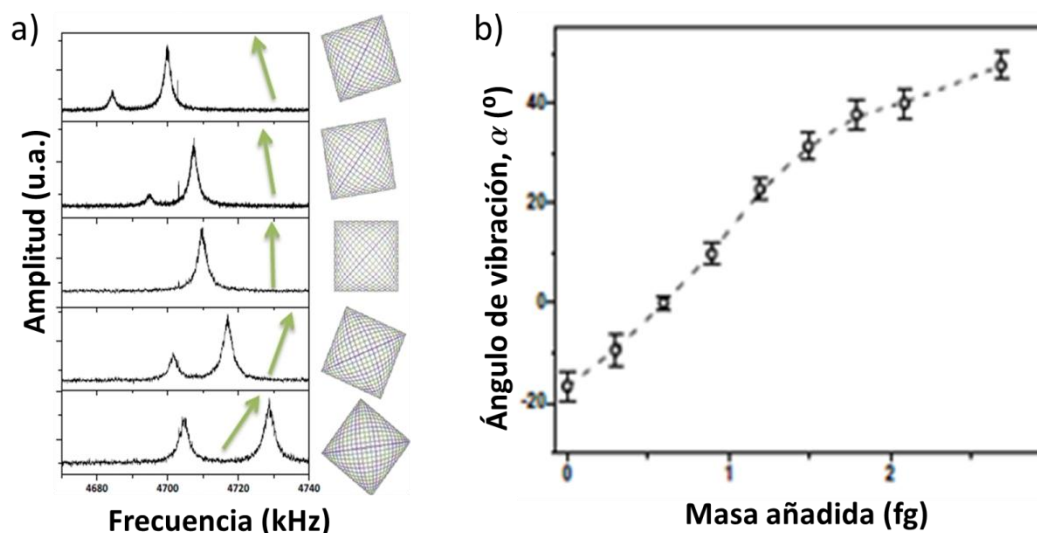


Figura 5.12. a) Espectro del ruido termomecánico inicial (arriba) de un nanohilo de silicio y después de sucesivas deposiciones de 200 attogramos sobre el extremo fijo y a 45° del eje óptico. La flecha indica la orientación del eje rápido de oscilación que se ve afectada por las deposiciones. b) Evolución del ángulo α (ángulo formado por el eje rápido de oscilación del nanohilo y el eje óptico) en función de la masa adsorbida sobre el extremo fijo del nanohilo y a 45° del eje óptico.

La figura 5.12.b muestra la evolución del ángulo α con las sucesivas deposiciones, la máxima variación del ángulo ocurre cuando la deposición se produce a 45° ($\alpha=0^\circ$), en acuerdo con la ecuación (5.16). En ese momento, cada deposición rota los planos de vibración entre 7° y 10° , acercando el eje rápido a la dirección sobre la que se adsorbe el carbono, siendo la sensibilidad en masa de 50 attogramos por grado. Conforme la masa se sigue depositando, los ejes continúan rotando pero disminuyendo la velocidad de rotación, hasta que el eje rápido se sitúa en la misma dirección que el carbono y deja de rotar.

Teniendo en cuenta que nuestro sistema experimental, tiene una sensibilidad a variaciones en la posición en torno a $10 \text{ pm Hz}^{-1/2}$. Si excitásemos los nanohilos para que tuviesen una amplitud de oscilación en torno a 100 nm , la incertidumbre del ángulo α sería solo de 0.01° , lo que implicaría sensibilidades en masa del orden de 100 zg . Nótese que la rotación de los planos de vibración, es un efecto de rigidez, así que la sensibilidad en masa dependerá del modulo de Young de las partículas adsorbidas.

5.4.3. Efectos de masa y de rigidez

Estudiaremos ahora el efecto de una adsorción sobre el eje rápido de vibración en función de la posición longitudinal. Como vimos teóricamente, este tipo de adsorción permitirá de forma muy sencilla desacoplar los efectos de masa y rigidez de la partícula adsorbida, ecuación (5.21).

La figura 5.13 muestra la suma y diferencias relativas, en función de la posición z_0 para deposiciones de 3 fg de carbono amorfo. La suma cambia desde un valor máximo y positivo cuando la deposición se produce en el extremo fijo y mínima y negativa si es en el extremo libre. La diferencia es nula en el extremo libre y máxima en el extremo fijo. Ajustando las curvas obtenidas a las expresiones teóricas y suponiendo una densidad, para el carbono amorfo depositado de 1.950 kg m^{-3} , obtenemos que el modulo de Young del material depositado es $E \approx 55 \text{ GPa}$.

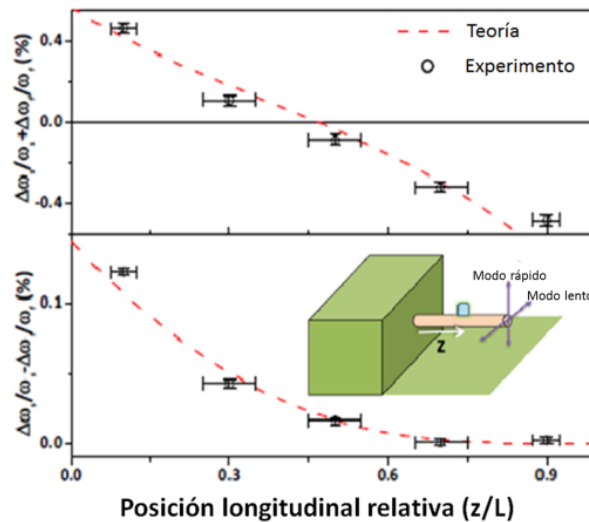


Figura 5.13. Suma (arriba) y diferencia (abajo) de los cambios relativos en frecuencia de ambos modos, para un nanohilo de silicio en función de la posición longitudinal donde se produce la adsorción de 3 fg de carbono amorfo sobre el eje rápido de vibración. Los puntos son datos experimentales y las líneas punteadas ajustes teóricos basados en las ecuaciones (5.14) y (5.21).

5.5. CONCLUSIONES

Durante este capítulo hemos analizado la capacidad de los nanohilos de silicio como sensores de masa. Debido a su baja masa, alta frecuencia y gran calidad estructural, que le proporciona un alto factor de calidad, estos dispositivos prometen ser de gran utilidad en su aplicación como sensores de masa dada su alta sensibilidad. Además su gran calidad estructural también le confiere un alto grado de simetría axial, que junto con las dimensiones nanométricas de su sección, proporcionan a estos dispositivos capacidades únicas entre los sensores nanomecánicos. Entre ellas destacan su sensibilidad a las propiedades elásticas de las partículas y a la dirección acimutal donde se depositan.

En primer lugar, caracterizamos el comportamiento dinámico de nuestros nanohilos debido al ruido termomecánico ópticamente. A partir de las amplitudes de oscilación medidas calculamos el grado de asimetría de los nanohilos. Hemos obtenido un coeficiente de asimetría medio igual a $\bar{\Omega} = 0,7 \%$ y en el mejor caso $\Omega = 0.1 \%$, que correspondería a una diferencia de 1 \AA entre el radio mayor y menor si nuestro nanohilo tuviese 200 nm de diámetro.

Para analizar los efectos que produce la adsorción de partículas sobre un nanohilo, desarrollamos un modelo basado en la teoría de la elasticidad bidimensional para pequeñas deformaciones. Nuestro modelo introduce tres parámetros cuyo seguimiento nos permitirá obtener la masa, rigidez y posición de las partículas adsorbidas. Estas tres magnitudes son la suma y la diferencia de los cambios relativos en frecuencia de ambos modos y la rotación de los planos de vibración. La suma de los cambios relativos en frecuencia depende tanto de efectos de masa como efectos de rigidez mecánica, mientras que la diferencia y la rotación solo son debidas a efectos de rigidez. Además, los efectos de masa serán máximos en los máximos de oscilación mientras los de rigidez en los nodos.

Experimentalmente, hemos demostrado dos de los nuevos fenómenos presentes en este tipo de dispositivos, la ruptura de la degeneración y la rotación de los planos de oscilación. Además, a partir de adsorciones de centenas de femtogramos de carbono amorfo sobre uno de los ejes de vibración, hemos determinado su modulo de Young, siendo $E_C = 55 \text{ GPa}$. Su alta sensibilidad tanto en masa como en rigidez los convierte en excelentes candidatos para el desarrollo de espectrómetros biológicos ultrasensibles[9].

Asumiendo que la sensibilidad en frecuencia está limitada por el ruido termomecánico, esta técnica nos permite tener una sensibilidad en la detección de masa de zeptogramos y en cuanto a la medida del modulo de Young, es capaz de discriminar diferencias de 0.1 kPa por femtogramo de muestra. Las proteínas deshidratadas tienen un modulo de Young en torno a $0.1\text{-}10 \text{ GPa}$, por lo que esta técnica sería capaz de detectar variaciones de 100 ppm en el modulo de Young de una proteína individual. La capacidad de los nanohilos de silicio para medir propiedades mecánicas con tanta sensibilidad, abre la puerta a importantes aplicaciones biomédicas, ya que las propiedades mecánicas juegan un papel muy importante en numerosos procesos biológicos.

REFERENCIAS

1. Feng, X.L., He, R., Yang, P., Roukes, M.L. "Very high frequency silicon nanowire electromechanical resonators" *Nano Letters*, **7**, 7 (2007).
2. Zhu, R., Wang, D.Q., Xiang, S.Q., Zhou, Z.Y., Ye, X.Y., Ieee, *Modeling and experimental study of nanoelectromechanical oscillator using single zinc oxide nanowire*, in *Mems 2008: 21st Ieee International Conference on Micro Electro Mechanical Systems, Technical Digest* 2008. p. 746-749.
3. Biedermann, L.B., Tung, R.C., Raman, A., Reifengerger, R.G., Yazdanpanah, M.M., Cohn, R.W. "Characterization of silver-gallium nanowires for force and mass sensing applications" *Nanotechnology*, **21**, 30 (2010).
4. Bai, X.D., Gao, P.X., Wang, Z.L., Wang, E.G. "Dual-mode mechanical resonance of individual ZnO nanobelts" *Applied Physics Letters*, **82**, 26 (2003).
5. Wu, D.H., Chien, W.T., Chen, C.S., Chen, H.H. "Resonant frequency analysis of fixed-free single-walled carbon nanotube-based mass sensor" *Sensors and Actuators a-Physical*, **126**, 1 (2006).
6. Ustunel, H., Roundy, D., Arias, T.A. "Modeling a suspended nanotube oscillator" *Nano Letters*, **5**, 3 (2005).
7. Sazonova, V., Yaish, Y., Ustunel, H., Roundy, D., Arias, T.A., McEuen, P.L. "A tunable carbon nanotube electromechanical oscillator" *Nature*, **431**, 7006 (2004).
8. Yang, Y.T., Callegari, C., Feng, X.L., Ekinici, K.L., Roukes, M.L. "Zeptogram-scale nanomechanical mass sensing" *Nano Letters*, **6**, 4 (2006).
9. Naik, A.K., Hanay, M.S., Hiebert, W.K., Feng, X.L., Roukes, M.L. "Towards single-molecule nanomechanical mass spectrometry" *Nature Nanotechnology*, **4**, 7 (2009).
10. Jensen, K., Kim, K., Zettl, A. "An atomic-resolution nanomechanical mass sensor" *Nature Nanotechnology*, **3**, 9 (2008).
11. Ilic, B., Craighead, H.G., Krylov, S., Senaratne, W., Ober, C., Neuzil, P. "Attogram detection using nanoelectromechanical oscillators" *Journal of Applied Physics*, **95**, 7 (2004).
12. Boisen, A. "Mass spec goes nanomechanical" *Nature Nanotechnology*, **4**, 7 (2009).
13. Li, M., Bhiladvala, R.B., Morrow, T.J., Sioss, J.A., Lew, K.-K., Redwing, J.M., Keating, C.D., Mayer, T.S. "Bottom-up assembly of large-area nanowire resonator arrays" *Nature Nanotechnology*, **3**, 2 (2008).
14. Fan, H.J., Werner, P., Zacharias, M. "Semiconductor nanowires: From self-organization to patterned growth" *Small*, **2**, 6 (2006).
15. Tamayo, J., Ramos, D., Mertens, J., Calleja, M. "Effect of the adsorbate stiffness on the resonance response of microcantilever sensors" *Applied Physics Letters*, **89**, 22 (2006).

16. Ramos, D., Tamayo, J., Mertens, J., Calleja, M., Zaballos, A. "*Origin of the response of nanomechanical resonators to bacteria adsorption*" Journal of Applied Physics, **100**, 10 (2006).
17. Ramos, D., Tamayo, J., Mertens, J., Calleja, M., Villanueva, L.G., Zaballos, A. "*Detection of bacteria based on the thermomechanical noise of a nanomechanical resonator: origin of the response and detection limits*" Nanotechnology, **19**, 3 (2008).
18. Ramos, D., Calleja, M., Mertens, J., Zaballos, A., Tamayo, J. "*Measurement of the mass and rigidity of adsorbates on a microcantilever sensor*" Sensors, **7**, 9 (2007).
19. Ramos, D., Arroyo-Hernandez, M., Gil-Santos, E., Tong, H.D., Van Rijn, C., Calleja, M., Tamayo, J. "*Arrays of Dual Nanomechanical Resonators for Selective Biological Detection*" Analytical Chemistry, **81**, 6 (2009).
20. Kim, S., Yi, D., Passian, A., Thundat, T. "*Observation of an anomalous mass effect in microcantilever-based biosensing caused by adsorbed DNA*" Applied Physics Letters, **96**, 15 (2010).
21. Gil-Santos, E., Ramos, D., Martinez, J., Fernandez-Regulez, M., Garcia, R., San Paulo, A., Calleja, M., Tamayo, J. "*Nanomechanical mass sensing and stiffness spectrometry based on two-dimensional vibrations of resonant nanowires*" Nature Nanotechnology, **5**, 9 (2010).
22. Sharos, L.B., Raman, A., Crittenden, S., Reifengerger, R. "*Enhanced mass sensing using torsional and lateral resonances in microcantilevers*" Applied Physics Letters, **84**, 23 (2004).
23. Dufour, I., Heinrich, S.M., Josse, F. "*Theoretical analysis of strong-axis bending mode vibrations for resonant microcantilever (bio)chemical sensors in gas or liquid phase*" Journal of Microelectromechanical Systems, **16**, 1 (2007).
24. San Paulo, A., Arellano, N., Plaza, J.A., He, R.R., Carraro, C., Maboudian, R., Howe, R.T., Bokor, J., Yang, P.D. "*Suspended mechanical structures based on elastic silicon nanowire arrays*" Nano Letters, **7**, 4 (2007).
25. Sanii, B., Ashby, P.D. "*High Sensitivity Deflection Detection of Nanowires*" Physical Review Letters, **104**, 14 (2010).
26. Nichol, J.M., Hemesath, E.R., Lauhon, L.J., Budakian, R. "*Displacement detection of silicon nanowires by polarization-enhanced fiber-optic interferometry*" Applied Physics Letters, **93**, 19 (2008).
27. Kouh, T., Karabacak, D., Kim, D.H., Ekinici, K.L. "*Diffraction effects in optical interferometric displacement detection in nanoelectromechanical systems*" Applied Physics Letters, **86**, 1 (2005).
28. Karabacak, D., Kouh, T., Ekinici, K.L. "*Analysis of optical interferometric displacement detection in nanoelectromechanical systems*" Journal of Applied Physics, **98**, 12 (2005).
29. Kang, J.H., Leissa, A.W. "*Three-dimensional vibration analysis of thick, tapered rods and beams with circular cross-section*" International Journal of Mechanical Sciences, **46**, 6 (2004).

Capítulo 6

Acoplamiento optomecánico en nanohilos de silicio: Amplificación y enfriamiento

Este capítulo trata sobre el acoplamiento optomecánico y la modificación de la respuesta dinámica del resonador. Por primera vez, se extiende el estudio de este tipo de sistemas a objetos nanométricos, como nanohilos de silicio.

En primer lugar haremos una breve introducción a las cavidades óptomecánicas, las fuerzas de retroalimentación presentes en ellas y los regímenes de operación: el enfriamiento y la amplificación; comentando sus aplicaciones. A continuación, describiremos el proceso de fabricación y caracterización de los nanohilos de silicio. Para favorecer el acoplamiento optomecánico, depositamos una fina capa de oro que producirá una fuerza fototérmica de retroalimentación.

A continuación, estudiaremos teóricamente tanto la dinámica de nuestro resonador influenciado por una fuerza de retroalimentación, como su origen fototérmico. Para ello estudiaremos, mediante simulaciones por elementos finitos, la interacción de los nanohilos de silicio, y en concreto de las distintas resonancias ópticas o modos de Mie, asociadas al confinamiento de la luz en estructuras con dimensiones por debajo de la longitud de onda, con el campo electromagnético que lo rodea. A partir de las simulaciones y de la teoría presentada anteriormente, calculamos la ganancia de nuestros dispositivos, que será dependiente del diámetro y de la posición del nanohilo. Estos cálculos se comparan con medidas experimentales mostrando un excelente acuerdo. En régimen de enfriamiento se ha logrado alcanzar temperaturas efectivas inferiores a 50 K, partiendo de la temperatura ambiente. En régimen de amplificación se alcanzó una estabilidad en frecuencia de 1 ppm, correspondiente a una sensibilidad en masa de 100 zg.

6.1. INTRODUCCIÓN AL ACOPLAMIENTO OPTOMECÁNICO

La optomecánica estudia el acoplamiento entre la luz y resonadores mecánicos[1-3]. Normalmente, un sistema optomecánico consiste en un resonador interactuando con fotones atrapados en una cavidad. El interés de los sistemas optomecánicos va desde la observación de fenómenos cuánticos en sistemas mesoscópicos[4-7], a la fabricación de sensores ultrasensibles[8-10]. Cuando la interacción optomecánica es suficientemente fuerte, los fotones pueden modificar la dinámica del resonador, extrayendo o bombeando energía a su movimiento[11]. La extracción de energía da lugar al enfriamiento del movimiento mecánico[12-14], mientras que el bombeo de energía provoca su amplificación [14, 15].

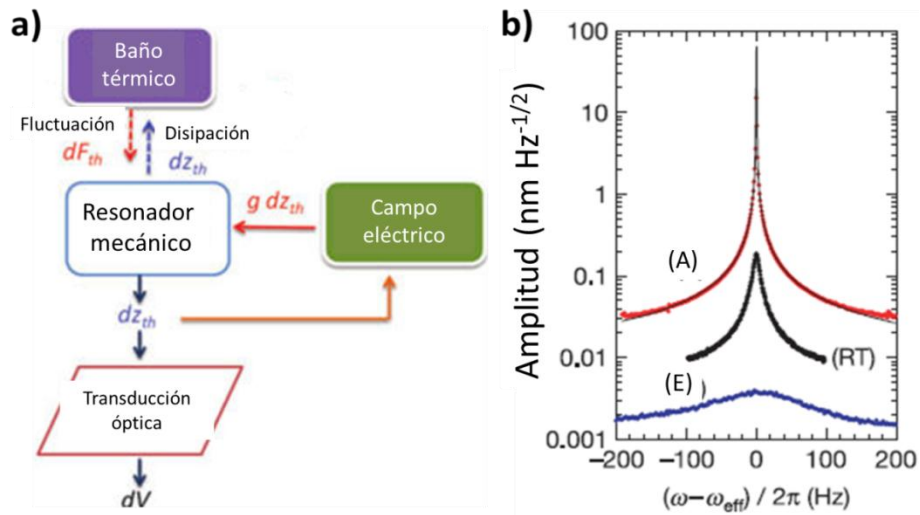


Figure 6.1. a) Esquema del sistema de retroalimentación de nuestro sistema optomecánico[8]. b) Amplitud de oscilación de un resonador debido al ruido termomecánico (RT), el mismo resonador en regímenes de enfriamiento (E) y amplificación (A). Los diferentes espectros se obtienen variando la fase relativa de las fuerzas ópticas y el movimiento del resonador[14].

Estos dos fenómenos pueden ser entendidos modelizando nuestro sistema optomecánico como un circuito de lazo cerrado que consta de dos elementos, el resonador y el campo electromagnético, figura 6.1.a. El esquema representa el sistema de retroalimentación que produce el acoplamiento optomecánico. El resonador se mueve modificando el campo electromagnético, lo que modifica la fuerza óptica que actúa sobre el resonador y por tanto su movimiento, modificando nuevamente el campo[8].

Las fuerzas ópticas que producen el acoplamiento entre la luz y el resonador pueden ser de distinta naturaleza[16]. La forma más elemental es la presión de radiación, en donde los fotones intercambian momento con el movimiento del resonador produciendo una fuerza mecánica [17, 18]. Pero existen otras formas de producir fuerzas a partir del campo electromagnético[19]. Un ejemplo es la fuerza fototérmica, que se debe al aumento de la temperatura que

produce la absorción de fotones por parte del resonador[20, 21]. Este método es de gran utilidad por su fácil aplicación, ya que solamente requiere la utilización de resonadores compuestos por distintos materiales, con coeficientes de expansión térmica distintos. Los cambios de temperatura provocan una expansión térmica diferente en ambos materiales lo que genera un momento angular a lo largo de la estructura y por tanto, una fuerza efectiva que dobla el resonador. Otros ejemplos son la fuerza opto-electrónica o la electrostricción presentes en semiconductores[22].

Las fuerzas ópticas tendrán un cierto desfase con respecto al movimiento del resonador determinado por el tiempo de respuesta de la fuerza. El tiempo de respuesta de la fuerza tendrá una componente común a todas las fuerzas, debido al tiempo de respuesta de la cavidad y una parte propia debido al mecanismo de la fuerza. El desfase dará lugar a que parte de la fuerza de retroalimentación actúe en cuadratura de fase, lo que modificará la disipación efectiva del resonador y por tanto, su respuesta dinámica. Un aumento de la disipación corresponde al enfriamiento efectivo de su movimiento, que junto con las bajas dimensiones del resonador, posibilitaría alcanzar energías tan bajas que permitirían el estudio del comportamiento cuántico de sistemas mecánicos macroscópicos [23, 24]. La disminución de la disipación puede dar lugar a la amplificación, cuya aplicación más inmediata es el aumento de la sensibilidad de los resonadores nanomecánicos, debido al aumento del factor de calidad mecánico efectivo, figura 6.1.b [14].

Una de las configuraciones más habituales para este tipo de dispositivos, consiste en posicionar un elemento mecánico con un alto índice de refracción cerca de un espejo, formándose una cavidad Fabry-Perot con una alta fineza, es decir, donde los fotones sufren múltiples reflexiones dentro de ella antes de abandonarla. Los fotones llegan a reflejarse miles e incluso millones de veces dentro de la cavidad, aumentando su tiempo de respuesta y dando lugar al desfase necesario para poder modificar la dinámica del resonador. Otros dispositivos más complejos acoplan el elemento mecánico directamente a una cavidad Farby-Perot formado por dos espejos macroscópicos[14, 25], o usan cavidades micro-toroidales[26, 27] o microdiscos [28, 29] acoplados al campo evanescente de una guía de onda, o también cristales fotónicos resonantes[23, 30].

Los nanohilos de silicio prometen ser dispositivos muy útiles en el campo de la optomecánica ya que al mayoría de sus aplicaciones se benefician de sus dimensiones nanométricas. Desafortunadamente su baja reflectividad y el aumento de la difracción evitan que se forme una cavidad Fabry-Perot de alta fineza[31, 32]. Pese a ello, los nanohilos de silicio exhiben resonancias ópticas, también llamadas resonancias de Mie, asociadas al confinamiento de la luz en estructuras con dimensiones por debajo de la longitud de onda, que pueden ser aprovechadas para producir el acoplamiento optomecánico[33, 34]. Estas cavidades tendrán muy baja fineza y por tanto su tiempo de respuesta será muy bajo. Para modificar la dinámica del resonador habrá que utilizar mecanismos que provoquen el desfase. Hemos elegido la fuerza fototérmica por su fácil implementación y sobretodo, por tener un tiempo de respuesta del orden del periodo de oscilación del resonador.

6.2. NANOHILOS DE SILICIO METALIZADOS CON ORO

Para producir una fuerza fototérmica solo es necesario recubrir una de las caras de los nanohilos con un material que tenga distinto coeficiente de expansión térmica[21]. Para ello metalizamos los nanohilos con una capa de oro. Por un lado, la capa debe ser lo suficientemente delgada para no romper demasiado la simetría de los nanohilos, ni aumentar su masa de forma notable. Por el otro, debe ser lo suficientemente gruesa para producir la fuerza fototérmica necesaria, y para dar lugar a la rotación de los planos de vibración, de forma que fijemos el modo rápido de oscilación sobre el eje óptico y así poder tratar el problema de manera unidimensional, ya que el modo lento ni será detectable ni verá modificada su respuesta dinámica debido al acoplamiento optomecánico [35].

6.2.1. Metalización

Para este trabajo hemos utilizado nanohilos de 6-8 μm de longitud y 100-250 nm de diámetro. En primer lugar, comprobamos si una deposición de 2 nm de cromo (capa de adhesión) y 8 nm de oro, es suficiente para girar los planos de vibración. Para ello, elegimos uno de nuestros chips y tras caracterizar el estado inicial de los nanohilos, realizamos la metalización a 60° respecto del eje óptico. La figura 6.2. muestra el espectro de ruido termomecánico de un nanohilo, con coeficiente de asimetría inicial $\Omega = 0.003$, antes y después de la metalización. Los planos de vibración se orientan con el eje rápido en la dirección de la deposición, en este caso, $\alpha = \beta = 55 \pm 2^\circ$. Solo alguno de los nanohilos que tenían $\Omega > 0.02$ no rotaron hasta este mismo ángulo, por lo que deducimos que la deposición se llevo a cabo con una desviación de 5° sobre el ángulo previsto.

Tras caracterizar otros nanohilos sin oro, y elegir aquellos para los que $\Omega < 0.02$, depositamos la misma cantidad de cromo y oro pero a un ángulo de 0° respecto del eje óptico, fijando el eje rápido de vibración sobre este.

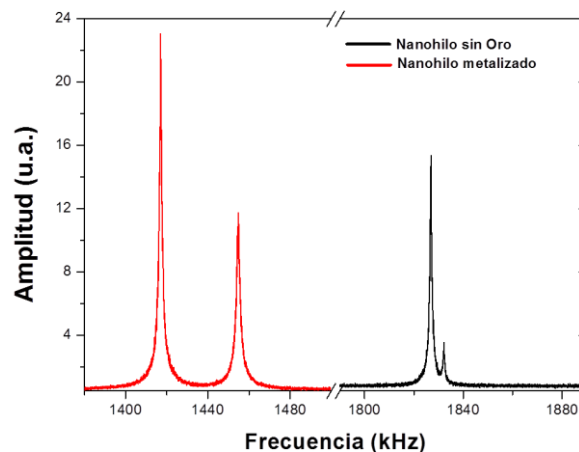


Figura 6.2. Espectro del ruido termomecánico de un nanohilo de silicio antes y después de la metalización (2 nm de cromo y 8 nm de oro) a 60° respecto del eje óptico.

6.2.2. Caracterización de las dimensiones del dispositivo

Para caracterizar las dimensiones de la cavidad se han utilizado dos técnicas distintas, imágenes de SEM para el diámetro del nanohilo y microscopia de fuerzas (AFM) para la medida de la distancia del nanohilo al sustrato. Por si durante su manipulación se pudiesen romper o modificar los nanohilos, ambas medidas se realizaron una vez finalizados todos los experimentos que mostraremos más adelante. La figura 6.3.a muestra una imagen detallada de SEM de un nanohilo y sus distintas zonas. Los nanohilos no son perfectamente cilíndricos ya que presentan cierta conificación, en torno a un 10-20%. Esta variación en el diámetro podría en un caso extremo cambiar el régimen dinámico del nanohilo cuando lo caractericemos ópticamente. Para evitarlo restringiremos nuestro estudio al caso de enfocar el haz en el extremo libre, donde la amplitud es máxima. Como el diámetro de nuestro spot es de unas $2\text{ }\mu\text{m}$, estimamos el diámetro del nanohilo a partir de la media entre el diámetro en el extremo libre y en el medio.

Para medir la distancia del nanohilo al sustrato con alta resolución, se utilizó un microscopio de fuerzas atómicas (AFM) - Veeco Multimode con controlador Nanoscope V en modo Peakforce. La figura 6.3.b muestra una imagen de la topografía de la muestra. La distancia es medida cerca del extremo fijo del nanohilo para evitar doblar el nanohilo. Haciendo múltiples medidas en cada nanohilo estimamos la incertidumbre de la medida en torno a 10 nm. Las imágenes fueron realizadas manteniendo la fuerza por debajo de los 100pN con puntas de nitruro de silicio de constante elástica $k=0,2\text{ N/m}$ y un diámetro de punta de 10 nm. La velocidad de las medidas fue inferior a 0.8 Hz.

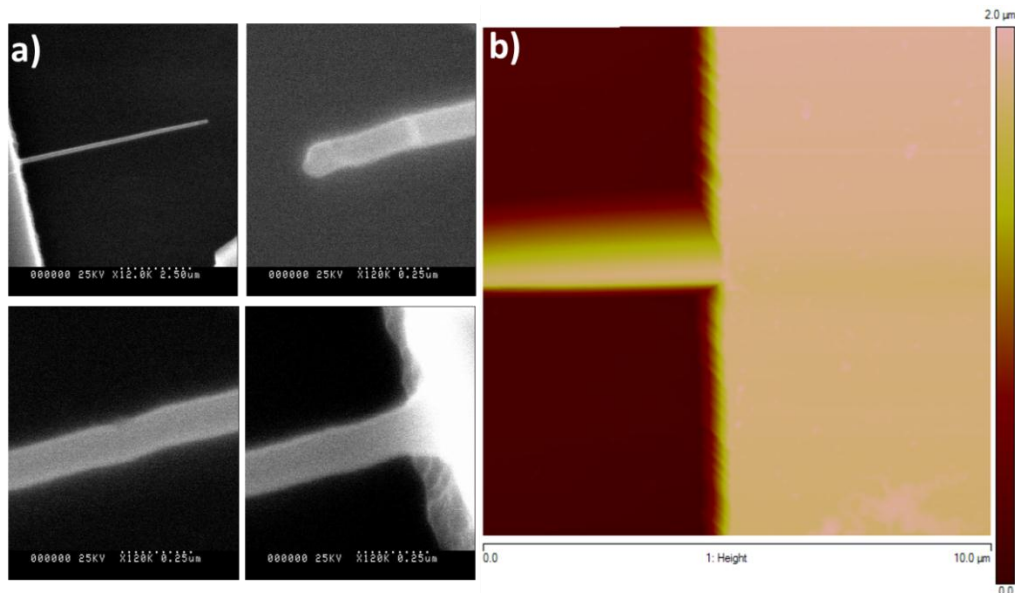


Figura 6.3.a) Imágenes de SEM de un nanohilo de silicio, donde se muestra en detalle los diámetros del extremo libre, el medio y el extremo fijo. **b)** Imágenes de AFM donde se muestra la distancia nanohilo-sustrato.

6.2.3. Caracterización óptica: Amplificación y enfriamiento

Para la caracterización óptica de los nanohilos metalizados volvemos a utilizar el sistema interferométrico, fijando la polarización de la luz paralela al nanohilo, por simplicidad y por haber sido mostrada como la más eficiente en la detección de nanohilos[36]. En esta ocasión, utilizaremos dos láseres con longitudes de onda diferentes, rojo (632 nm) y verde (543 nm). Su potencia la podemos controlar con un filtro, alcanzando un máximo de 1 mW sobre la muestra.

Las medidas nos muestran que la respuesta dinámica de nuestros nanohilos ha sido modificada. Muchos de ellos presentan factores de calidad que difieren en órdenes de magnitud con el original. Algunos de ellos amplifican su movimiento, otros lo enfrían y los menos, conservan su respuesta dinámica original. Además, para muchos de ellos la respuesta dinámica se modifica de manera distinta para cada longitud de onda, mostrando ambos regímenes de operación. La figura 6.4 muestra dos ejemplos de nanohilos que cambian su dinámica al modificar la longitud de onda del laser, pasando de amplificación a enfriamiento. La potencia del laser es la misma en ambos casos y de $500 \mu\text{W}$. Con el laser rojo, el nanohilo 1 muestra un factor de calidad de 173000, mientras que el nanohilo 2 tiene un factor de calidad de 320. Al cambiar al laser verde, el nanohilo 1 disminuye su factor de calidad hasta a 1000, mientras que el nanohilo 2 lo aumenta hasta 65000. Ambos nanohilos se encuentran a la misma distancia del sustrato, $D=1450 \text{ nm}$, pero su diámetro es distinto, $d_1=150 \text{ nm}$ y $d_2=180 \text{ nm}$. Además, cuando minimizamos la potencia incidente, ambos nanohilos muestran un factor de calidad similar y en torno a 3000, para ambas longitudes de onda.

Estos resultados demuestran que el acoplamiento optomecánico modifica la dinámica de nuestros nanohilos. Por primera vez, se extiende la optomecánica a resonadores con dimensiones inferiores a la longitud de onda. Más adelante mostraremos más resultados experimentales, pero para comprender mejor lo que esta sucediendo, primero estudiaremos en detalle la dinámica de los resonadores sometidos a una fuerza de retroalimentación y el origen fototérmico de esta fuerza.

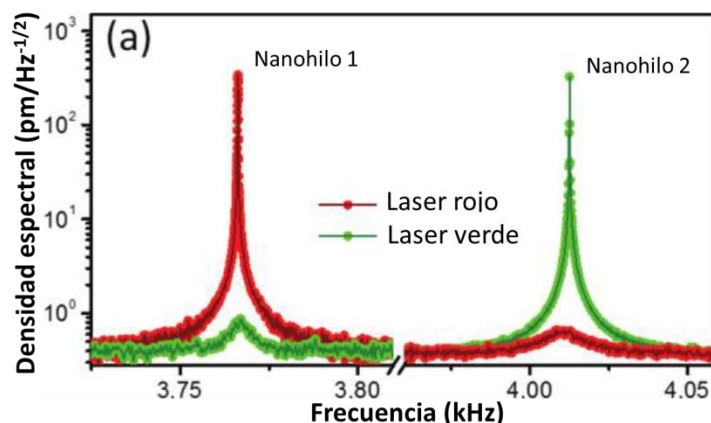


Figura 6.4. Espectro del ruido termomecánico de un nanohilo de silicio antes y después de la deposición de 2 nm de cromo y 8 nm de oro, a 60° respecto del eje óptico.

6.3. TEORÍA DEL ACOPLAMIENTO OPTOMECAÁNICO

Al haber fijado los ejes principales de vibración del nanohilo paralelos al eje óptico y al sustrato, podemos considerar solo el movimiento paralelo al eje óptico, ya que el otro modo ni es detectable ni verá modificada su dinámica debido al acoplamiento optomecánico. Modelizamos el nanohilo como un oscilador armónico, con disipación y sujeto, además de a las fuerzas térmicas, a una fuerza adicional de retroalimentación dependiente de la posición[37]

$$m\ddot{z} + \gamma\dot{z} + kz = F_{th} + F_{ret}(z) \quad (6.1)$$

En un principio, incluiremos en el razonamiento todo tipo de fuerzas

$$m\ddot{z} + \gamma\dot{z} + kz = F_{th} + \sum_n F_n(z)$$

En el límite de pequeños desplazamientos, como es el caso del movimiento termomecánico, podemos aproximar la fuerza con los dos primeros términos de la serie de Taylor, obteniendo

$$F_{ret}(z) = \sum_n \left(F_{n0}(z) + \left[\frac{\partial F_n}{\partial z} \right]_0 z \right) \quad (6.2)$$

El primer término expresa la componente continua que llevará al nanohilo a una nueva posición de equilibrio, pero en ningún caso modificará su respuesta dinámica. El segundo término, que puede ser positivo o negativo dependiendo de la pendiente, es proporcional al desplazamiento del nanohilo. Debido al desfase entre la fuerza y el movimiento, esta variación de la fuerza tendrá parte real y parte imaginaria. La parte real modifica la constante elástica del nanohilo, haciéndolo más blando o más duro, mientras que la parte imaginaria puede modificar la respuesta dinámica del nanohilo, ya que modifica su disipación. Por tanto, la ecuación (6.1) se puede expresar como

$$m\ddot{z} + \gamma\dot{z} + kz = F_{th} + \sum_n \left(F_{n0}(z) + \text{Re} \left(\left[\frac{\partial F_n}{\partial z} \right]_0 \right) z + \text{Im} \left(\left[\frac{\partial F_n}{\partial z} \right]_0 \right) zi \right) \quad (6.3)$$

Considerando que el movimiento de nuestro resonador es armónico, la parte imaginaria de la fuerza de retroalimentación puede escribirse como

$$\text{Im} \left(\left[\frac{\partial F_n}{\partial z} \right]_0 \right) zi = \text{Im} \left(\left[\frac{\partial F_n}{\partial z} \right]_0 \right) \frac{\dot{z}}{\omega_0} \quad (6.4)$$

Además, definimos la ganancia del acoplamiento optomecánico, g , como la parte imaginaria del gradiente de fuerzas

$$g_n = \text{Im} \left(\left[\frac{\partial F_n}{\partial z} \right]_0 \right) \quad (6.5)$$

Por tanto, despreciando los efectos de la fuerza estática, por no producir ningún tipo de efecto sobre el resonador, la ecuación (6.5) la rescribimos como

$$m\ddot{z} + \dot{z} \left(\gamma - \sum_n \frac{g_n}{\omega_0} \right) + z \left(k - \sum_n \text{Re} \left(\left[\frac{\partial F_n}{\partial z} \right]_0 \right) \right) = F_{th} \quad (6.6)$$

De esta ecuación se deduce que las fuerzas ópticas pueden modificar la rigidez de nuestro resonador[38]

$$k_{eff} = k - \text{Re} \left(\left[\frac{\partial F_n}{\partial z} \right]_0 \right) \quad (6.7)$$

y lo que es más importante, su disipación

$$\gamma_{eff} = \gamma - \sum_n \frac{g_n}{\omega_0} \quad (6.8)$$

Despreciando el cambio de rigidez, por tratarse de un efecto menor, y de acuerdo con el teorema de fluctuación disipación, podemos expresar la temperatura efectiva de los modos de oscilación como

$$T_{eff} = \frac{\gamma}{\gamma_{eff}} T \quad (6.8)$$

Como consecuencia se ve modificada la amplitud de oscilación termomecánica, que a la frecuencia de resonancia viene dada por

$$A = 2 \frac{\sqrt{\gamma K_B T B}}{\omega_0 (\gamma - \sum_n \frac{g_n}{\omega_0})} \quad (6.9)$$

Siendo B el ancho de banda definido como el inverso del tiempo de adquisición. Cuando la ganancia sea positiva la amplitud crece, así como la temperatura efectiva y el factor de calidad, debido a la disminución de la disipación efectiva, lo que aumenta la energía del resonador. Cuando la ganancia es negativa la amplitud de oscilación decrece y también su temperatura efectiva y factor de calidad, debido al aumento de la disipación efectiva, lo que disminuye la energía del resonador.

Nótese, que la ganancia es proporcional a la parte imaginaria de la pendiente de la fuerza, por lo que es necesario que exista un desfase entre la fuerza de retroalimentación y el movimiento del resonador, para modificar su dinámica.

Tratemos ahora el origen de la fuerza óptica que modifica la dinámica de nuestros dispositivos, que en un principio podría ser la presión de radiación, las fuerza fototérmica, las fuerza optoelectrónica o las fuerza electrostrictiva, entre otras. Todas ellas tendrán un cierto desfase con el movimiento del resonador, por lo

que introducimos una función que tenga en cuenta este desfase, $h_n(t - t')$, que será la función respuesta que nos dará la contribución de la fuerza, F_n , en un momento, t , por un cambio repentino, $z(t-t')$, por lo tanto

$$F_{\text{ret}}(t) = \sum_n F_n(t) = \sum_n \int_0^t \frac{dF_n(t')}{dt} h_n(t - t') dt' \quad (6.10)$$

Supondremos esta función de respuesta como una exponencial decreciente, y por tanto definimos el tiempo de respuesta, τ_n , característico de cada tipo de fuerza

$$h_n(t - t') = 1 - \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_n}\right) \quad (6.11)$$

Este tiempo de respuesta determina, junto con la frecuencia del oscilador, el desfase de la fuerza con su movimiento. Además, el tiempo de respuesta tiene una componente común a todas las fuerzas, debido al tiempo de respuesta de la cavidad, y otra debida a los mecanismos de la fuerza óptica

$$\tau_n = \tau_c + \tau_n' \quad (6.12)$$

La baja fineza de nuestra cavidad, relacionada con el tiempo que pasan los fotones dentro de ella, y que nos indica que estos se reflejan entre dos y cinco veces dentro de los nanohilos, proporciona un tiempo de respuesta de la cavidad muy bajo, del orden de los attosegundos, por lo que en ningún caso proporcionará el desfase necesario para modificar la dinámica del resonador. En el caso de las fuerzas ópticas mediadas por presión actúan de forma instantánea, por lo que teniendo en cuenta la frecuencia de nuestros resonadores, en torno a MHz, la fuerza se modulará en fase con el movimiento, lo que no modifica la dinámica del resonador. En el caso de la fuerza óptica mediada por efectos fototérmicos, la difusión del calor proporciona un tiempo de respuesta del orden del periodo de oscilación de nuestro resonador, lo que induce cierto desfase y por tanto, que exista una parte imaginaria de la fuerza considerable y que si que puede modificar su respuesta dinámica. El resto de fuerzas ópticas pueden considerarse despreciables.

Por último destacar que las fuerzas ópticas mediadas por presión de radiación si que modifican la rigidez de nuestro resonador y este efecto podría utilizarse también para retroalimentar el movimiento del nanohilo, mediante un proceso conocido como amplificación paramétrica[39]. La excitación paramétrica consiste en modular la rigidez al doble de la frecuencia y en fase con el oscilador. De todos modos, para estos dispositivos, la dependencia espacial de la modulación de la rigidez esta lejos de producir estos efectos.

En la siguiente sección calculamos la fuerza fototérmica de retroalimentación. Este cálculo también nos servirá para explicar en detalle los modos de Mie y su interacción con el campo electromagnético, lo que provocará la dependencia de la fuerza con el movimiento del nanohilo. El desfase vendrá dado por la difusión del calor a lo largo del nanohilo.

6.4. FUERZA FOTOTÉRMICA

Para hacer un estudio detallado de la fuerza fototérmica seguiremos tres pasos. En primer lugar realizamos el cálculo de la potencia absorbida por el nanohilo resolviendo las ecuaciones de Maxwell. A continuación aplicamos la ecuación de difusión del calor para obtener la modulación de la temperatura a lo largo del nanohilo como consecuencia de su movimiento a la frecuencia de oscilación. Por último obtenemos la fuerza fototérmica que actúa en cuadratura de fase, debido al distinto coeficiente de expansión térmica de los materiales, lo que genera un estrés axial que conlleva un momento y por tanto una fuerza efectiva.

Las dos próximas subsecciones tratarán el estudio de la absorción del nanohilo, lo que nos servirá para introducir las resonancias ópticas o modos de Mie, presentes en nuestros nanohilos de silicio. También estudiaremos su interacción con el campo electromagnético que lo rodea. En nuestro caso este campo será una onda estacionaria, lo que producirá la dependencia de la absorción del nanohilo con la distancia al sustrato y por tanto, de la fuerza con su movimiento. Finalmente, en la última subsección calculamos la fuerza fototérmica, a partir de la absorción, utilizando las ecuaciones de Euler-Bernoulli.

6.4.1. Modos de Mie

Para el cálculo de la absorción solucionamos las ecuaciones de Maxwell mediante simulaciones por elementos finitos, para lo que utilizamos el módulo de radio frecuencia del programa comercial COMSOL Multiphysics.

Aprovechando la simetría de nuestros nanohilos suponemos su sección circular y reducimos nuestro problema tridimensional a un problema bidimensional y estudiando únicamente lo que ocurre en la sección transversal del nanohilo. Además suponemos esta circular siendo una buena aproximación de su sección hexagonal, de este modo la solución se simplifica y el costo computacional decrece de forma drástica. La figura 6.5 muestra un esquema del modelo propuesto, aunque en esta subsección no consideraremos el sustrato. Nótese que los elementos de la figura no están a escala, en nuestras simulaciones la región de simulación y el sustrato son unas 50 y 20 veces más grandes que el diámetro del nanohilo, respectivamente. La región de simulación está rodeada por una capa de un material ideal (PML) cuyo objetivo es absorber toda la luz y no reflejar nada, independientemente del ángulo con que incida. Las dimensiones de ambas regiones son optimizadas para lograr la convergencia del problema con un mínimo coste computacional, elegimos $d_{SIM} = 12 \mu\text{m}$ y $d_{PML} = 0,5 \mu\text{m}$.

El haz laser es descrito como un haz gaussiano de ancho w_0 , longitud de onda λ y enfocado en el centro del nanohilo. La polarización es paralela al eje del cilindro (TE). Para ambos materiales hemos usado diferentes valores de la parte real e imaginaria de la permitividad dependiendo de la longitud de onda utilizada: $\epsilon_{Si} = 16.88 + 0.37 i$ y $\epsilon_{Au} = -6.2 + 2.1 i$ en $\lambda = 632 \text{ nm}$ y $\epsilon_{Si} = 15.1 + 0.165 i$ y $\epsilon_{Au} = -10.7 + 0.9 i$ en $\lambda = 543 \text{ nm}$.

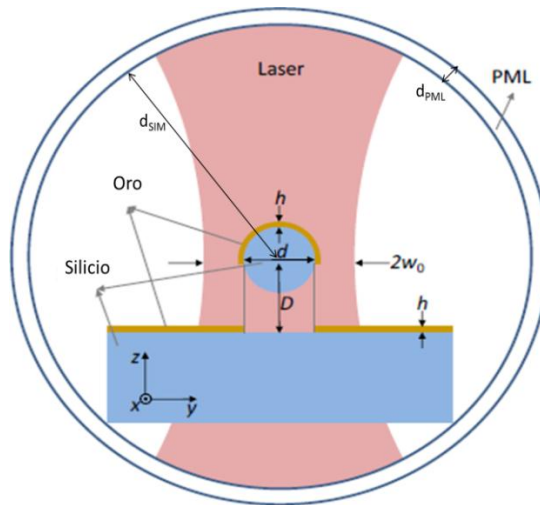


Figura 6.5. Dibujo esquemático donde se muestra la definición de las dimensiones utilizadas en las simulaciones.

En primer lugar tratemos el problema de un nanohilo sin sustrato. La figura 6.6 muestra el porcentaje de potencia absorbida por el nanohilo en función de su diámetro, para un tamaño de spot de $w_0=1 \mu\text{m}$. En la gráfica también se representa la distribución de campo eléctrico en las resonancias ópticas. La potencia absorbida por el nanohilo se calcula a partir del campo eléctrico de scattering, E y su permitividad ϵ , como

$$P_{abs} = \omega_E |E|^2 \text{Im}(\varepsilon) \quad (6.13)$$

Donde ω_E es la frecuencia angular de la onda electromagnética.

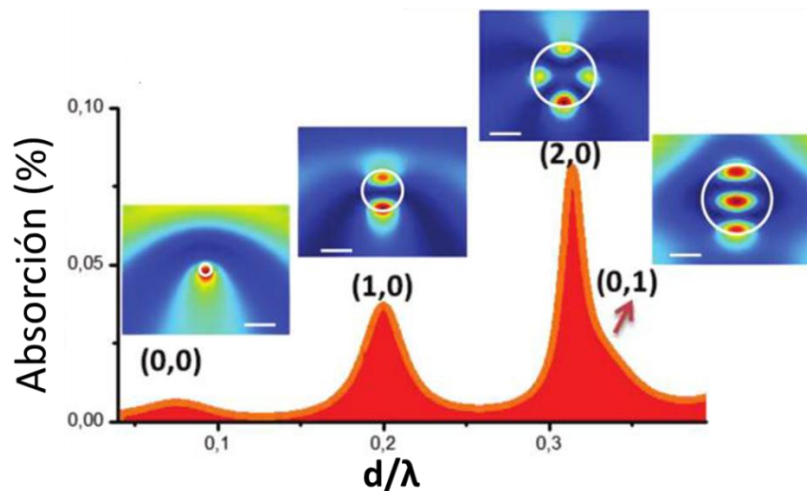


Figura 6.6. Potencia absorbida por un nanohilo de silicio, sin sustrato, en función de la relación entre su diámetro y la longitud de onda, siendo $w_0=2$ mm y $\lambda=632$ nm. Las imágenes representan la norma del campo eléctrico, dentro del nanohilo, en las resonancias ópticas.

Estas resonancias ópticas, también llamadas resonancias de Mie, confinan la luz dentro del nanohilo atrapando los fotones en orbitas circulares debidas a múltiples reflexiones internas. Cada resonancia puede identificarse con una dupla de números enteros (m, l). Físicamente, podemos identificar m con el número de longitudes de onda alrededor de la circunferencia del nanohilo y l con el número de máximos presentes en el nanohilo en la dirección radial. En la figura 6.6 podemos ver la distribución de campo de los cuatro primeros modos de Mie.

6.4.2. Interacción de los modos de Mie con la onda estacionaria

Pasemos a considerar también el sustrato y para ello, lo primero será resolver el problema sin nanohilo, figura 6.7.a. La distribución de campo electromagnético muestra la formación de una onda estacionaria de interferencia, generada por el haz incidente y el reflejado por el sustrato. Como el desfase entre ambos haces es aproximadamente 180° , existe un mínimo de campo cerca de la intercara. La figura 6.7.b muestra lo que ocurre cuando un nanohilo de silicio se la distribución de campo por la presencia del nanohilo, confinándose dentro del mismo. La interacción del nanohilo con el campo electromagnético dependerá fuertemente de su posición respecto al campo estacionario, pero también de su diámetro, ya que determinará el modo óptico que sustenta y por tanto su forma. Este es el origen de la dependencia de la absorción del nanohilo con su posición y por tanto con su movimiento. Por el mismo motivo, el campo electromagnético que recogemos en nuestro fotodetector también varía con el movimiento del nanohilo, lo que permite que midamos sus vibraciones.

Nótese que la separación entre máximos y mínimos de la onda estacionaria depende de la longitud de onda utilizada, en nuestro caso alrededor de 150 nm dependiendo del laser utilizado, lo que nos proporciona una extraordinaria sensibilidad al movimiento.

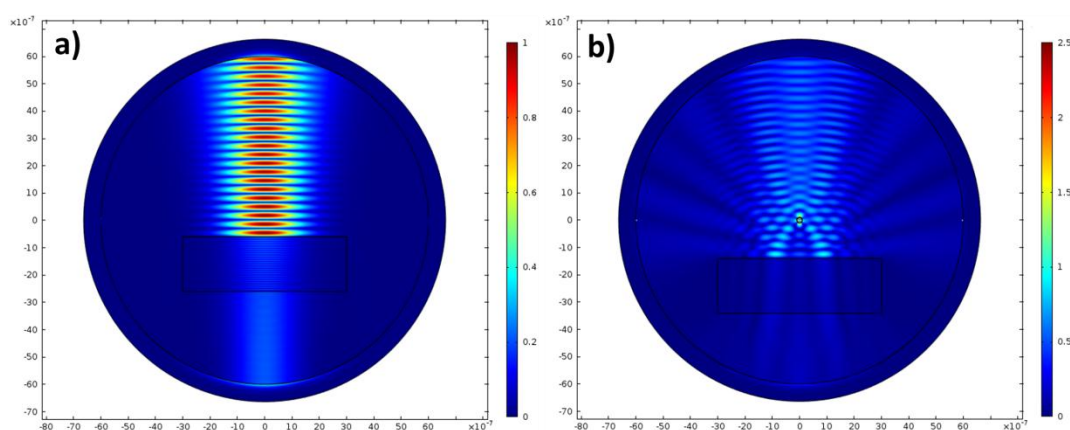


Figura 6.7. Norma del campo eléctrico normalizada: a) sin nanohilo, donde se aprecia la onda estacionaria generada. b) con un nanohilo interaccionando dentro de la onda estacionaria, el campo electromagnético se ve alterado confinando la luz dentro del nanohilo.

Analicemos en profundidad el problema de la absorción del nanohilo en función de su distancia al sustrato. La figura 6.8.a muestra la potencia absorbida por el nanohilo en función de su diámetro para dos distancias distintas respecto al sustrato, que coinciden con un máximo y un mínimo de la onda estacionaria. Para los modos (0,0) y (2,0), la absorción es mínima cuando el nanohilo se encuentra en un mínimo de la onda estacionaria y máxima en sus máximos. Lo contrario ocurre para el modo (1,0), debido a su distribución de campo eléctrico dentro del nanohilo, que tiene un mínimo en su eje paralelo al sustrato, por lo que su absorción es máxima en los mínimos de la onda estacionaria y mínima en sus máximos. La figura 6.8.b muestra dos ejemplos del “encendido” y “apagado” de los modos ópticos en función de su posición.

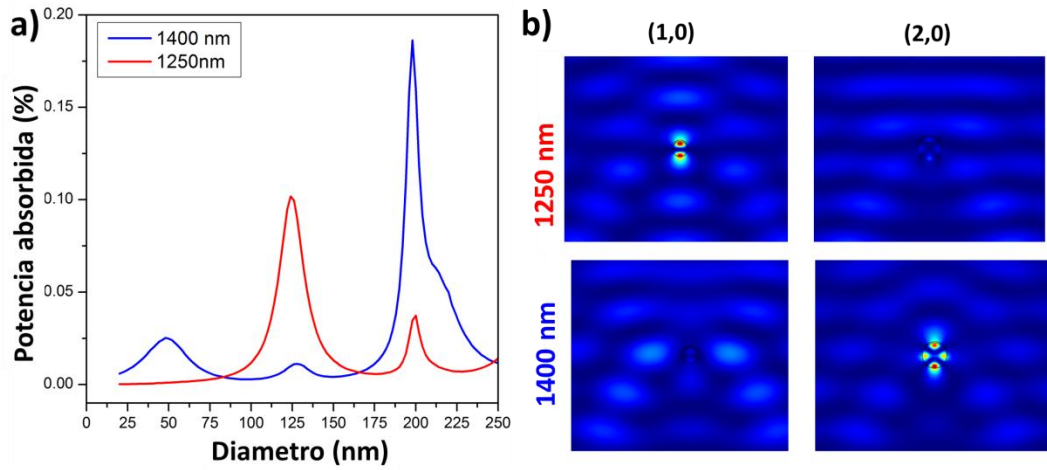


Figura 6.8. a) Porcentaje de potencia absorbida por un nanohilo de silicio en función de su diámetro siendo $\lambda=632$ nm, calculado en dos posiciones distintas, $D=1400$ nm (azul) y $D=1250$ nm (rojo). b) Intensidad de campo para dos distancias y dos diámetros diferentes, donde se muestra el “encendido” y “apagado” de dos modos de Mie. Cuando los nanohilos se encuentran en su posición idónea, confinan el campo eléctrico absorbiendo gran parte de la potencia óptica.

La absorción depende tanto de la posición del nanohilo como de su diámetro, pero también depende de la longitud de onda utilizada. La figura 6.9 muestra el porcentaje de absorción de los nanohilos en función de su diámetro y distancia al sustrato para dos longitudes de onda: verde (543 nm) y rojo (632 nm). Las figuras parecen idénticas pero multiplicadas por un factor de escala en ambos ejes. Este factor de escala es la longitud de onda.

En cuanto a la dependencia de la posición de los máximos de absorción con respecto al diámetro, hemos visto que esta relacionada con los modos de Mie. Se puede demostrar que la posición de estos es proporcional a longitud de onda e inversamente proporcional al índice de refracción de nuestro material, así como a una función que depende del modo

$$d_{m,l_{max}} = f(m, l) \cdot \lambda/n \quad (6.14)$$

Por tanto al disminuir la longitud de onda y aumentar el índice de refracción de los nanohilos, los modos de Mie aparecerán en diámetros menores y cada vez más próximos.

Respecto a la dependencia con la distancia al sustrato, los máximos se encontrarán en los máximos o en los mínimos de la onda estacionaria. Por lo que también dependerá de la longitud de onda y de la forma del modo óptico

$$D_{m,l_{max}} = f'(m, l) \cdot \left(\frac{\lambda}{4}\right) + h(\varphi(\lambda)) \quad (6.15)$$

$$f'(m, l) = \begin{cases} 2n & (m, l) = (0,0), (2,0) \\ 2n + 1 & (m, l) = (0,1) \end{cases} \quad (6.16)$$

Donde $h(\varphi(\lambda))$ es una función del desfase entre la onda incidente y la reflejada y por tanto de la longitud de onda, y n es un número entero. De estas ecuaciones se deduce que al disminuir la longitud de onda se reduce la distancia entre máximos. Las variaciones de absorción en función de la posición serán mayores y también se mejora la sensibilidad al movimiento. Además, teniendo en cuenta la ecuación (6.14), la utilización de nanohilos con un alto índice de refracción, como es el caso del silicio, también beneficia su detección, ya que estos modos podrán aparecer en estructuras con dimensiones más reducidas.

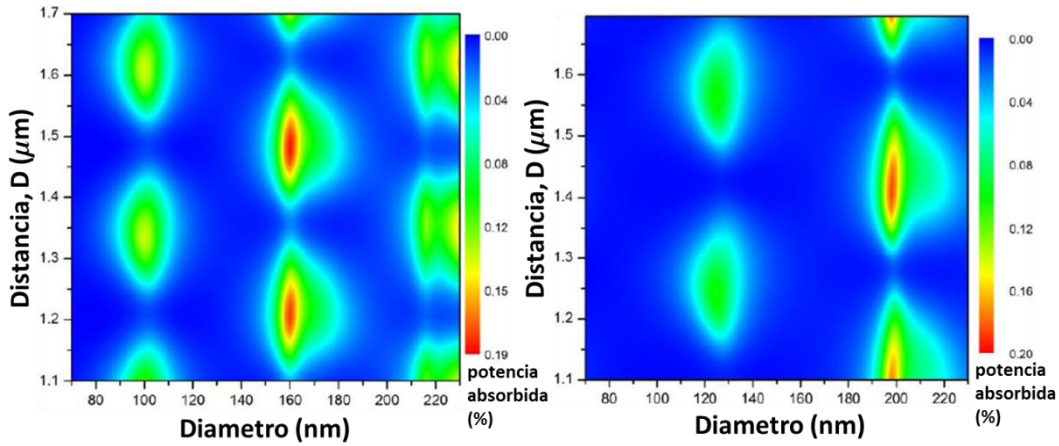


Figura 6.9. Porcentaje de potencia absorbida por el nanohilo en función del diámetro, d , y la posición, D , para dos longitudes de onda: $\lambda=543$ nm y $\lambda=632$ nm.

6.4.3. Distribución de temperatura y fuerza fototérmica

Como acabamos de ver, los nanohilos de silicio absorben parte de la luz cuando son iluminados con un laser. La luz absorbida se transformará en calor aumentando la temperatura del nanohilo. Al estar compuesto por dos materiales con distinto coeficiente de expansión, su expansión térmica genera una fuerza que dobla el nanohilo, figura 6.10. Los efectos estáticos de esta fuerza son despreciables, ya que no alteran la dinámica del nanohilo, aunque en ocasiones

podrían modificar sus propiedades, no siendo este el caso[40]. Pero como vimos en la sección 6.3, la dependencia de esta fuerza con la posición del nanohilo puede modificar la dinámica del resonador, si esta se aplica en cuadratura de fase con el movimiento. Cuando el nanohilo oscila, y esto ocurre siempre por el teorema de fluctuación-disipación, la potencia absorbida varía y por tanto su temperatura, lo que origina una variación de la fuerza generada. Por ser de origen fototérmico, el tiempo de difusión del calor en el material proporciona el desfase necesario para producir una fuerza en cuadratura de fase con el movimiento, lo que finalmente modificará la dinámica del resonador.

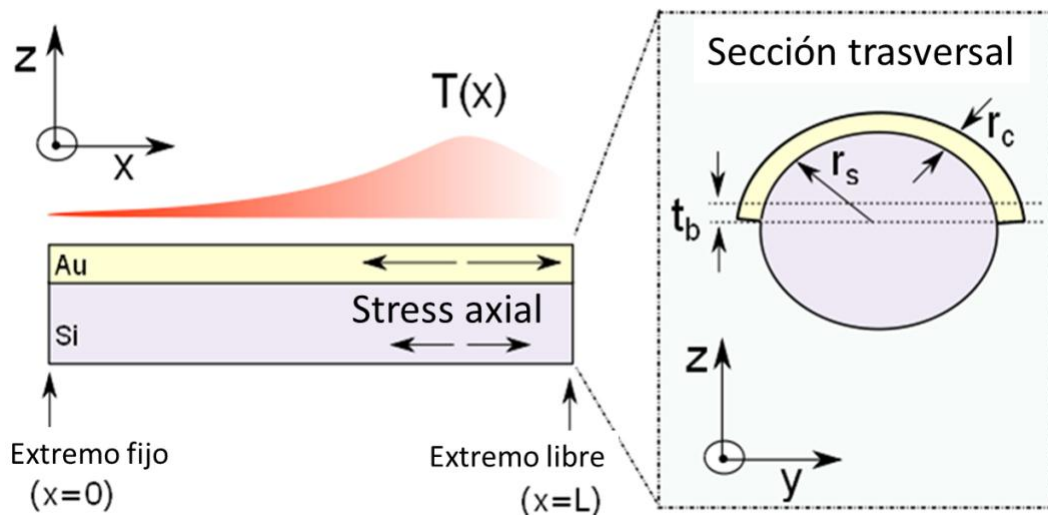


Figura 6.10. Dibujo esquemático de la fuerza fototérmica generada por el aumento de la temperatura en un nanohilo de silicio metalizado.

En el razonamiento que se sigue a continuación hacemos las siguientes aproximaciones:

- La distribución de temperatura en los ejes z e y es constante debido a que el diámetro del nanohilo es mucho menor que la profundidad de penetración de la potencia absorbida.
- Restringimos nuestro estudio al análisis dinámico estacionario. Por lo que las coordenadas temporal y espacial son separables.
- La dependencia temporal de la temperatura tiene el mismo comportamiento temporal que la fuente de absorción óptica.
- Despreciamos las pérdidas de calor por convección y por radiación por encontrarnos en alto vacío y por tratarse diferencias de temperatura pequeña.

La distribución temporal de la temperatura con respecto a un determinada temperatura de fondo, $T(x,t)$, se obtiene aplicando la ecuación de difusión del calor unidimensional

$$A\rho_e c_{pe} \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} = A\kappa_e \frac{\partial T(x,t)}{\partial x^2} + p(x,t) \quad (6.17)$$

Donde ρ_e es la densidad efectiva, c_{pe} su capacidad calorífica efectiva, κ_e su conductividad térmica efectiva, A es el área de la sección transversal y $p(x,t)$ es la calor generado en el nanohilo por unidad de volumen. Todas las magnitudes efectivas son calculadas promediando su valor en el núcleo del nanohilo, silicio, y en el recubrimiento, oro.

La vibración del nanohilo a lo largo de su eje viene dada por, $w(x,t) = C\varphi_0 \exp(i\omega t)$. Donde C es la amplitud de oscilación, ω_0 la frecuencia de resonancia mecánica y φ_0 la forma del modo fundamental de vibración. Como la absorción del nanohilo depende de su distancia al sustrato y no considerando su componente estática, podemos escribir $p(x,t)$ como el producto del gradiente de la potencia absorbida, calculada numéricamente en el plano yz , la oscilación del nanohilo y la forma del haz gaussiano que enfocamos sobre el nanohilo a lo largo del eje x

$$p(x,t) = C\varphi_0 \partial_z P_{abs}(z) \frac{\exp\left(-\frac{2(x-x_0)}{w_0}\right)}{\sqrt{\frac{\pi}{2}w_0}} \exp(i\omega t) \quad (6.18)$$

Donde w_0 es el ancho del haz, x_0 es su posición a lo largo del eje del nanohilo y $\partial_z = \frac{\partial}{\partial z}$. Asumimos que el comportamiento temporal del campo de temperaturas esta determinado por la fuente de absorción y de esa forma separamos las variables temporal y espacial de la función temperatura

$$T(x,t) = C\theta(x,\omega_0) \exp(i\omega_0 t) \quad (6.19)$$

Donde $\theta(x,\omega_0)$ depende de la frecuencia de oscilación del resonador. Combinando las ecuaciones (6.18) y (6.19) podemos expresar la ecuación (6.17) como

$$A\rho_e c_{pe} \frac{\partial \theta(x,\omega_0)}{\partial x} = A\kappa_e \frac{\partial \theta(x,\omega_0)}{\partial x^2} + \varphi_0 \partial_z P_{abs}(z) \frac{\exp\left(-\frac{2(x-x_0)}{w_0}\right)}{\sqrt{\frac{\pi}{2}w_0}} \quad (6.20)$$

La geometría del problema impone las siguientes condiciones de contorno

$$\frac{\partial}{\partial x} \theta(x,\omega_0) \Big|_{x=L} = 0 \quad (6.21)$$

$$\theta(x,\omega_0) \Big|_{x=0} = 0 \quad (6.22)$$

Que corresponden con pérdidas de energía nulas en el extremo libre y con un incremento de temperatura nulo en el extremo fijo, respectivamente. Las simulaciones por elementos finitos muestran que estas condiciones siempre se cumplen en nuestro problema. Aplicando estas condiciones de contorno a la ecuación (6.20), obtenemos finalmente la variación de temperatura a la frecuencia de resonancia, que será una función compleja

$$\theta(x, \omega_0) = \theta_{Re}(x, \omega_0) + \theta_{Im}(x, \omega_0)i \quad (6.23)$$

A partir de ahora solo consideramos la parte imaginaria por ser la responsable de modificar la dinámica de nuestro resonador. Como resultado de la distribución de temperatura inducida por la absorción, aparece un campo de estrés en la estructura, que produce un momento. Esto es debido a que los nanohilos de silicio están metalizados con oro, y estos materiales tienen diferentes coeficientes de expansión térmica. El momento generado puede calcularse a partir de la teoría de Euler-Bernoulli como[41]

$$\Lambda(x) = \theta_{im}(x) \left(\int_0^{2\pi} \left(\int_0^{r_s} \sigma_s(\rho \sin(\theta) - r_s - t_b) \rho d\rho \right) d\theta + \int_0^{\pi} \left(\int_{r_s+r_c}^{r_s+r_c} \sigma_c(\rho \sin(\theta) - r_s - t_b) \rho d\rho \right) d\theta \right) \quad (6.24)$$

Donde los subíndices s y c se refieren al nanohilo de silicio y a la capa de oro, r es el espesor de las diferentes capas y $\sigma_s = \frac{\alpha_s E_s}{1-\nu_s}$, y $\sigma_c = \frac{\alpha_c E_c}{1-\nu_c}$, siendo α el coeficiente de expansión térmica.

Por ahora hemos calculado la parte imaginaria del gradiente del momento, Λ , pero para obtener la ganancia debemos conocer la parte imaginaria del gradiente de la fuerza. Aplicando el principio de los trabajos virtuales a la ecuación de Euler-Bernoulli obtenemos finalmente esta ganancia

$$g = - \frac{L \int_0^L \Lambda(x, \omega_0) \frac{d^2 \varphi_0(x)}{dx^2} dx}{\int_0^L \varphi_0(x)^2 dx} \quad (6.25)$$

La ganancia es proporcional a la parte imaginaria del gradiente del momento, Λ , y esta lo es a la parte imaginaria del gradiente de temperaturas, θ_{im} , que es dependiente del diámetro del nanohilo y de su posición respecto al sustrato. Por tanto, la ganancia también depende de estos parámetros. Además, también depende de la longitud de onda, lo que nos permite modificar el régimen dinámico de los nanohilos.

En la siguiente sección mostraremos los resultados experimentales obtenidos a partir de decenas de nanohilos de silicio y su comparación con los cálculos teóricos. Además, analizaremos en detalle la estabilidad en frecuencia que nos permiten alcanzar el régimen de amplificación lo que determinará la sensibilidad en masa de nuestros dispositivos.

6.5. AMPLIFICACIÓN Y ENFRIAMIENTO

La figura 6.11 muestra los mapas de ganancia calculada a partir de la teoría y los cálculos numéricos mostrados en la sección anterior. En ella se han normalizado el diámetro de los nanohilos y su distancia al sustrato por la longitud de onda de la luz utilizada. Ya hemos explicado con anterioridad los motivos de esta normalización. Un valor positivo de la ganancia conlleva la amplificación del modo fundamental del modo de vibración (naranja), mientras que un valor negativo conlleva su enfriamiento (azul). En el gráfico aparecen reflejados datos experimentales de nanohilos que muestran amplificación (puntos rojos) y enfriamiento (azul), todos ellos con una potencia incidente de $500 \mu\text{W}$. Existe un buen acuerdo entre los datos experimentales y el modelo teórico propuesto. Además los cálculos de la ganancia están en acuerdo con los valores experimentales encontrados como veremos a continuación.

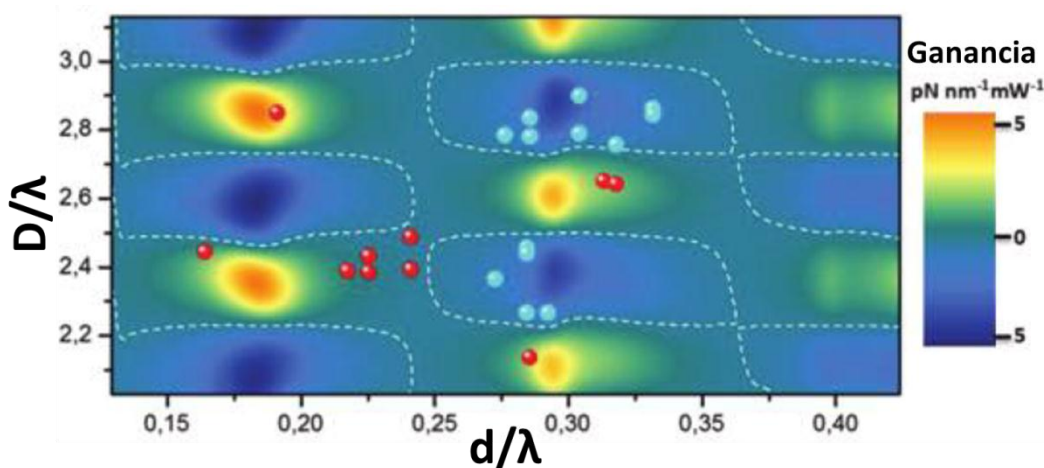


Figura 6.11. Ganancia en función del diámetro, d , y la posición, D , normalizados por la longitud de onda, λ . En la grafica se muestran datos experimentales de nanohilos que presentan amplificación (puntos rojos) y enfriamiento (puntos azules).

6.5.1. Estudio en función de la potencia del haz

A continuación vamos a analizar en detalle la respuesta dinámica del nanohilo para cada uno de los regímenes de operación. Para ello elegimos dos de los nanohilos que presentan amplificación y enfriamiento, y analizamos su amplitud de oscilación en función de la intensidad de la luz del laser que lo ilumina, que en este caso será el rojo (632 nm). Los dos nanohilos se encuentran a una distancia del sustrato de 1520 nm y sus diámetros son 120 nm y 180 nm respectivamente. El nanohilo más ancho presenta amplificación mientras que el otro presenta enfriamiento. La figura 6.12.a muestra los espectros de oscilación de estos dos nanohilos para distintas intensidades de luz. En ambos casos, cuando la intensidad es suficientemente baja, $60 \mu\text{W}$, es posible medir el movimiento de

ruido térmico del nanohilo, y por tanto, su factor de calidad intrínseco, que se encuentra en torno a 3000. Pero cuando el haz supera cierta potencia la respuesta dinámica se modifica y el factor de calidad aumenta en el caso de la amplificación y disminuye en el caso del enfriamiento.

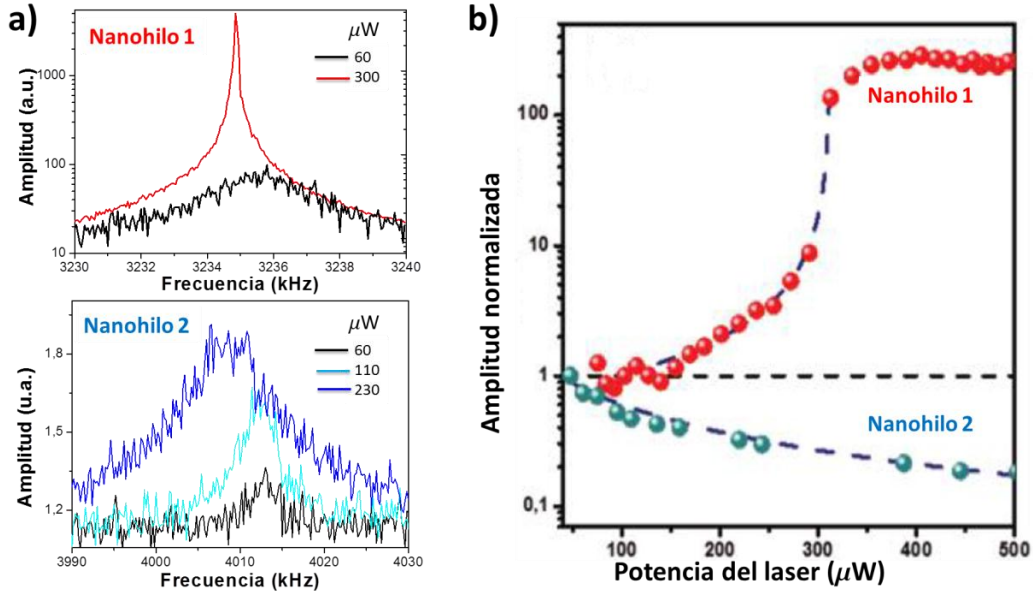


Figura 6.12. a) Espectros de amplitud de oscilación para varias potencias ópticas en dos nanohilos que presentan regímenes de operación distintos: Amplificación y enfriamiento. b) Evolución detallada de la amplitud de oscilación normalizada en función de la potencia para ambos nanohilos.

La figura 6.12.b representa la amplitud de oscilación para estos dos nanohilos, en función de la intensidad del laser. El nanohilo que se encuentra en régimen de enfriamiento, desciende su amplitud de oscilación unas seis veces cuando aumentamos la potencia de 60 a 500 μW . Lo que conlleva el alcance de un factor de calidad de 600 y una temperatura efectiva menor a 50 K. En el caso del nanohilo que presenta amplificación, para una potencia de 350 μW , el factor de calidad es de 140000, lo que corresponde con una anchura a media altura de 25 Hz. Los datos experimentales son ajustados a la ecuación (6.9), obteniendo una ganancia por unidad de potencia en el rango de 0,1-1 pN/nm por mW, en acuerdo con los cálculos teóricos mostrados en la figura 6.11.

La medida de la amplitud de oscilación en función de la intensidad del laser nos permite determinar la intensidad crítica a partir de la cual se produce la amplificación o el enfriamiento. Para el nanohilo que presenta amplificación, esta intensidad crítica es de 100 μW . Este valor será distinto para cada nanohilo, dependiendo de su diámetro y su distancia al sustrato, además de su longitud. La intensidad crítica será menor cuando tengamos un diámetro en el que la absorción sea máxima y nos encontremos a la distancia en la cual la variación de esta absorción también sea máxima.

6.5.1. Estabilidad en frecuencia

Analicemos la estabilidad en frecuencia de los nanohilos que presentan amplificación, ya que esta determinará la sensibilidad en masa de nuestros dispositivos. Los nanohilos en régimen de amplificación presentan factores de calidad del orden de 100000, pero a la hora de su determinación estamos limitados por el tiempo de adquisición y las fluctuaciones en frecuencia de nuestro nanohilo. Estas fluctuaciones son debidas a inestabilidades de la intensidad del haz que llega al nanohilo, que pueden ser debidas a las fluctuaciones de la intensidad del laser o a vibraciones mecánicas. Por tanto, el origen último de estas fluctuaciones es también fototérmico. La absorción de calor en los nanohilos permite la amplificación mediante el efecto bimetalico, pero también puede alterar su frecuencia de resonancia, empeorando su estabilidad. Además, los efectos ópticos por presión de radiación también podrían estar detrás de estas inestabilidades.

La figura 6.13 muestra la comparación de dos espectros con tiempos de adquisición distintos, $t=20$ s, $t=1$ s. En la primera de ellas, al ser una medida muy larga, observamos muchos de los estados en los que se ha encontrado el nanohilo durante la medida. Las fluctuaciones en frecuencia del nanohilo integradas en el tiempo, nos proporciona una señal llena de resonancias que hace muy difícil la medida del factor de calidad. Cuando bajamos el tiempo de adquisición esta resonancia es única, pero si queremos medir el factor de resonancia con exactitud, tenemos que tener más resolución en frecuencia. Al tener un factor de calidad tan alto, el tiempo de adquisición tiene que ser largo, para lograr medir con un ancho de banda de 1 Hz aproximadamente y así poderlo medir con suficiente precisión y por tanto volveremos a medir múltiples picos.

La determinación del factor de calidad requiere la minimización de las fluctuaciones en frecuencia y por tanto de la minimización de la intensidad de la luz. Además, lo que es más importante, nuestra estabilidad en frecuencia también depende de la intensidad.

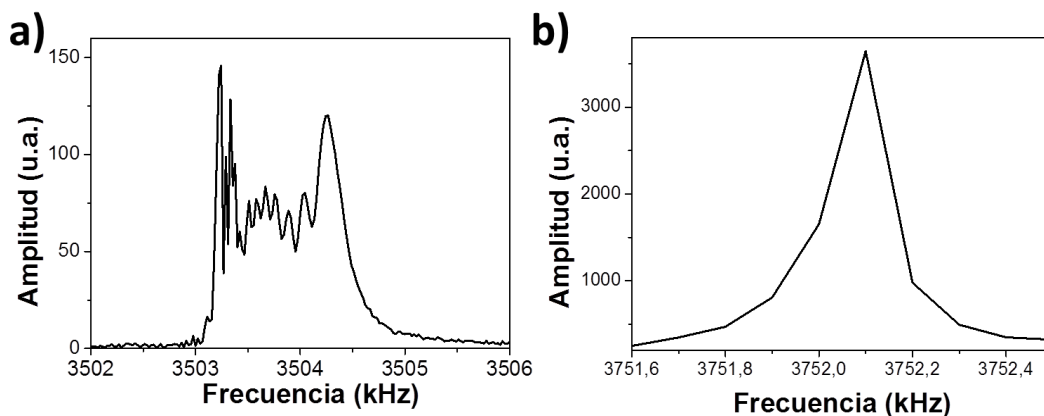


Figura 6.13. Espectro de un nanohilo en régimen de amplificación, utilizando 500 μm y un tiempo de adquisición de: a) $t=20$ segundos b) $t=1$ s.

Para demostrarlo elegimos uno de nuestros mejores nanohilos que presenta un factor de calidad más alto, $Q=400000$ y que posiblemente sea mayor que un millón. La figura 6.15 representa la frecuencia de resonancia en función del tiempo para 3 intensidades de luz diferentes. A medida que la intensidad de luz decrecen nuestra resolución aumenta, alcanzando su máximo entorno a la intensidad crítica. A partir de ella se deja de producir la amplificación y la estabilidad decrece.

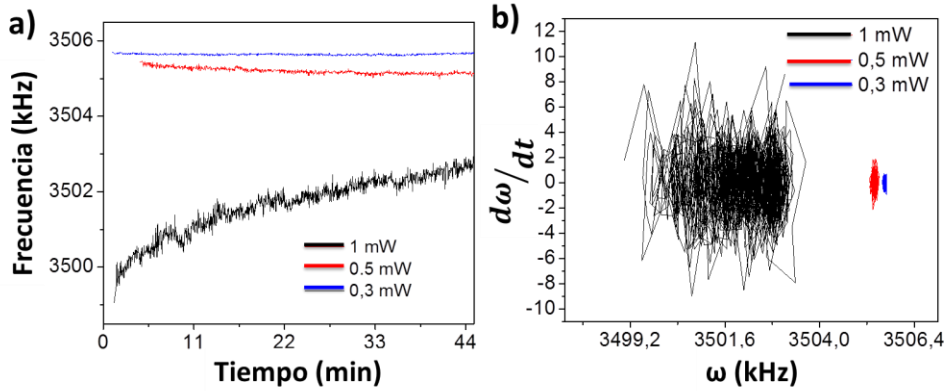


Figura 6.15. a) Frecuencia en función del tiempo y b) variación de la frecuencia en el tiempo en función de la frecuencia, para 3 potencias incidentes diferentes.

Una vez determinamos la potencia para la cual tenemos una mayor estabilidad, en torno a 300 mW, calculamos con precisión la estabilidad en frecuencia en función del tiempo de integración. La figura 6.16 muestra la variación relativa en frecuencia en función del tiempo y la estabilidad en frecuencia en función del tiempo de integración, para esa potencia. Para tiempos de adquisición bajos, nuestra resolución en frecuencia es de $4 \cdot 10^{-6}$ lo que correspondería con una masa 400 zg. Pero al aumentar el tiempo de adquisición supera la decena de segundos la sensibilidad aumenta hasta las decenas de zg.

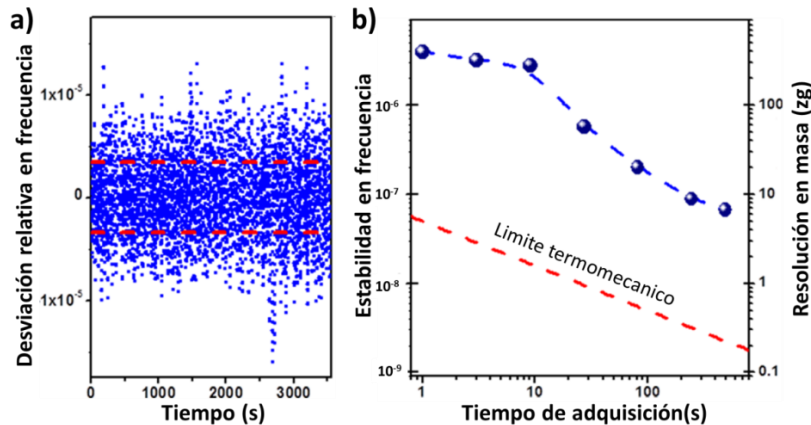


Figura 6.16. Porcentaje de potencia absorbida por el nanohilo en función del diámetro, y la posición, D, para dos longitudes de onda: $\lambda=543$ nm y $\lambda=632$ nm.

6.5.2. Amplificación con luz no coherente

Hasta el momento hemos utilizado láseres de luz coherente, su longitud de coherencia se encuentra entorno a los 2-3 metros dada la longitud de la cavidad. Esta longitud de coherencia nos permitía hacer interferencia entre el espejo y nuestros resonadores acoplados. Como hemos visto, en el caso de los nanohilos, no es necesaria la utilización del espejo ni la formación de una cavidad Fabry-Perot de alta fineza. El hecho de que los fotones reflejados dentro del nanohilo apenas sufran un par de reflexiones y que la distancia entre el nanohilo y el sustrato sea apenas de 1-1.5 μm , hace que no parezca necesario una alta coherencia espacial de la luz en nuestros dispositivos, por lo que no parece necesario que los láseres coherentes. La utilización de láseres no coherentes permitiría una notable reducción del costo de los dispositivos. Estos láseres, pese a llamarse no coherentes, presentan cierta coherencia espacial, de alrededor de 10-20 μm y por tanto podrían producir la interferencia necesaria cerca del sustrato y ser capaces de medir el movimiento de los nanohilos e incluso producir efectos optomecánicos. La figura 6.17.a muestra un espectro de uno de nuestros nanohilos que presenta amplificación, medido con un laser de luz no coherente (632 nm, 13MC-M60, Schäfter-Kirchhoff Corp.) y una potencia de 1 mW. Como en el caso de luz coherente medimos la amplificación de uno de nuestros nanohilos y este presenta un factor de calidad mayor a 100000. Además su estabilidad en frecuencia es similar a la lograda con el laser coherente en torno a 1ppm, figura 6.17.b.

Toda luz tiene cierta coherencia espacial, incluso la luz solar, para la cual la coherencia vendría dada por la mitad de su longitud de onda. Los dispositivos basados en nanoresonadores unidimensionales pueden abrir las puertas a la aplicación de la luz solar para producir el acoplamiento optomecánicos y en un futuro crear dispositivos que aprovechen esta energía[42].

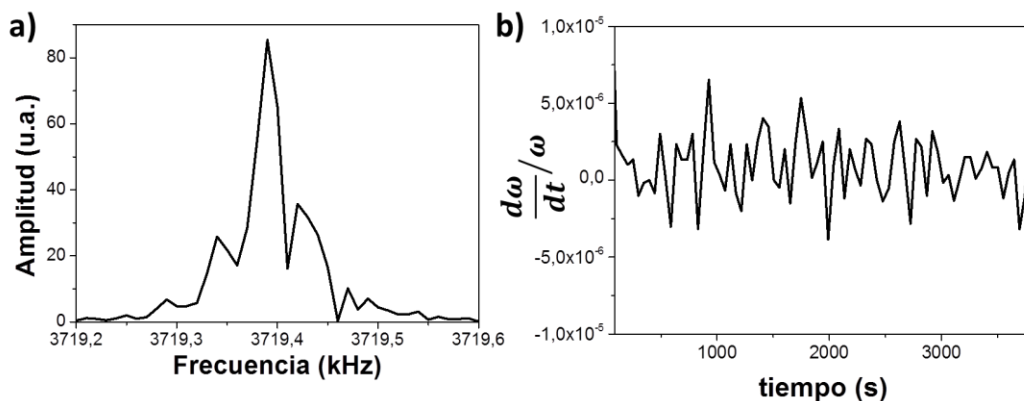


Figura 6.17. a) Espectro de oscilación de un nanohilo iluminado con un laser de luz no coherente y 1 mW de potencia. b) Estabilidad en frecuencia relativa en función del tiempo.

6.6. CONCLUSIONES

En este capítulo, hemos demostrado que las resonancias de la luz asociadas al confinamiento de la luz en semiconductores, permite extender eficientemente el acoplamiento optomecánicos y sus efectos observados en objetos macroscópicos, a objetos nanométricos, como son los nanohilos de silicio. El concepto de explotar las resonancias de Mie junto con un control minucioso en el proceso de fabricación permitirá el desarrollo de dispositivos optomecánicos basados en nanohilos de silicio y sustentado por bajas intensidades ópticas. En cuanto al estudio de fenómenos cuánticos estos dispositivos podrían lograr el límite cuántico más fácilmente que las estructuras micrométricas que se usan actualmente, debido a sus dimensiones tan reducidas. En su uso como sensor, la amplificación de su movimiento aumenta su factor de calidad, lo que le permite alcanzar estabilidades sin precedentes.

Tras introducir de forma breve la teoría de las cavidades optomecánicas y descartar fuerzas ópticas de cualquier otro tipo de origen, hemos calculado la ganancia de nuestros dispositivos debida a la fuerza fototérmica. Para ello hemos utilizado cálculos numéricos realizados mediante simulaciones por elementos finitos, y un modelo teórico basado en la ecuación difusiva del calor y la teoría de Euler-Bernuilli. El modelo sugiere que la ganancia depende del diámetro de los nanohilos, debido a las resonancias de Mie, y de su posición respecto del sustrato, debido a la onda estacionaria que forma el haz incidente y el reflejado. Los datos experimentales obtienen muy buen acuerdo con la teoría mostrada.

Se han logrado enfriar nanohilos hasta temperaturas efectivas por debajo de 50 K y por encima de 50000 K, partiendo de temperatura ambiente. Los factores de calidad de los nanohilos en régimen de amplificación, se encuentran en torno a 1 millón, aunque nuestro sistema de adquisición de la señal no nos permite determinarlo con exactitud. Esto correspondería con una anchura a media altura del orden de hercios. Se han logrado estabilidades en frecuencia de 1 ppm en decenas de segundos de integración. Una alta estabilidad en frecuencia es esencial para la aplicación de estos dispositivos como espectrómetros biológicos. Una estabilidad en frecuencia de 1 ppm corresponde a una sensibilidad en masa de 100 zg. Usando nanohilos más pequeños, midiendo modos de vibración superiores y optimizando el sistema de transducción óptica. El alcance de una resolución de 0.1 zg abriría la puerta a la detección de proteínas con capacidad de distinguir la falta de un solo aminoácido.

Otras ventajas de estos dispositivos con respecto a previos estudios, es que no necesitan una fuente de excitación externa, ya que la propia detección es la que modifica el régimen dinámico del resonador, lo que simplifica de manera notable el diseño de los sensores. Además, se ha demostrado que no hace falta la utilización de lasers coherentes para producir estos efectos optomecánicos. Esto abaratará futuros diseños y puede dar lugar a nuevas aplicaciones, como es su uso para el aprovechamiento de energía[42].

6.7. TRABAJO FUTURO

El estudio de la detección del movimiento y la respuesta dinámica de nanoresonadores unidimensionales, como los nanohilos de silicio, influenciada por el acoplamiento optomecánico, así como su aplicación a la detección de agentes biológicos, seguirá siendo uno de los temas de interés del laboratorio de bionanomecánica. A continuación resumimos brevemente cuales serán los focos de interés en los próximos años.

6.7.1. Espectrómetro biológico

Como hemos visto a lo largo de la tesis, los resonadores nanomecánicos ofrecen una sensibilidad sin precedentes en masa y en el modulo de Young de las partículas que adsorbe. Su uso para el diseño de un espectrómetro capaz de detectar moléculas biológicas una a una y con capacidad de identificarlas e incluso distinguir si estás sufren alguna alteración, posibilitaría la detección precoz de enfermedades[43].

Como objetivo prioritario del laboratorio durante los próximos años, se desarrollará un sistema que permita la detección insitu de moléculas biológicas, basado en nanohilos de silicio. Debido al decaimiento del factor de calidad y por tanto, de la sensibilidad de estos sensores en medios líquidos, el sistema se basará en un sistema de electrospray que permitirá transportar las moléculas biológicas a nuestros resonadores que se encontrarán en vacío. La figura 6.18 muestra una imagen del sistema experimental en sus fases iniciales de montaje.

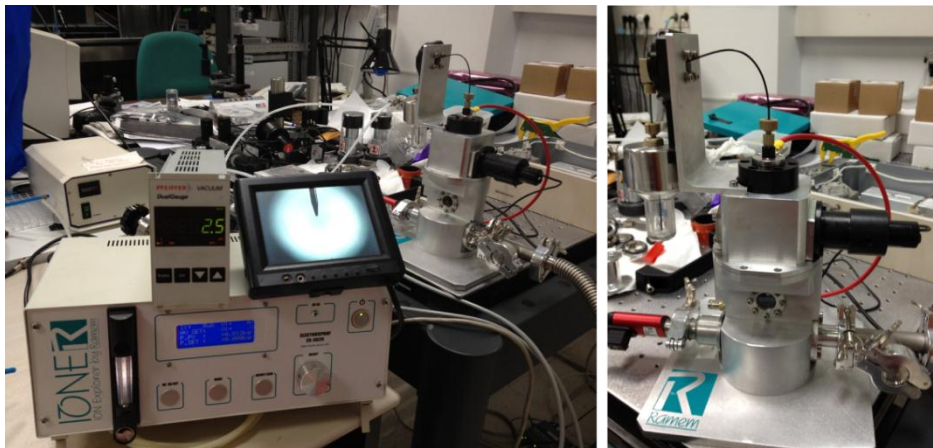


Figura 6.18. Imágenes del sistema de electrospray en sus fases iniciales de montaje.

6.7.2. Nanohilos Acoplados

Otro de los objetivos futuros será el uso de nanohilos de silicio acoplados. De hecho, ya se han realizado medidas de este tipo de dispositivos. Este acoplamiento surgió de manera fortuita a través de la unión de las bases de los

nanohilos, figura 6.19.a. La figura 6.19.b muestra el espectro de resonancia, antes y después, de un nanohilo de silicio acoplado a otro de frecuencia de resonancia similar, junto con una imagen del dispositivo. Al depositar carbono sobre uno de los nanohilos, los 4 modos de resonancia, asociados al desdoblamiento de los dos modos fundamentales de vibración, ven alteradas sus frecuencias, lo que confirma que están acoplados y se trata de modos colectivos de oscilación.

El desarrollo de estos dispositivos de manera controlada, permitirá la unión de todas las propiedades de los resonadores acoplados y los nanoresonadores unidimensionales, que junto con los efectos optomecánicos, darán lugar a nuevos conceptos y aplicaciones.

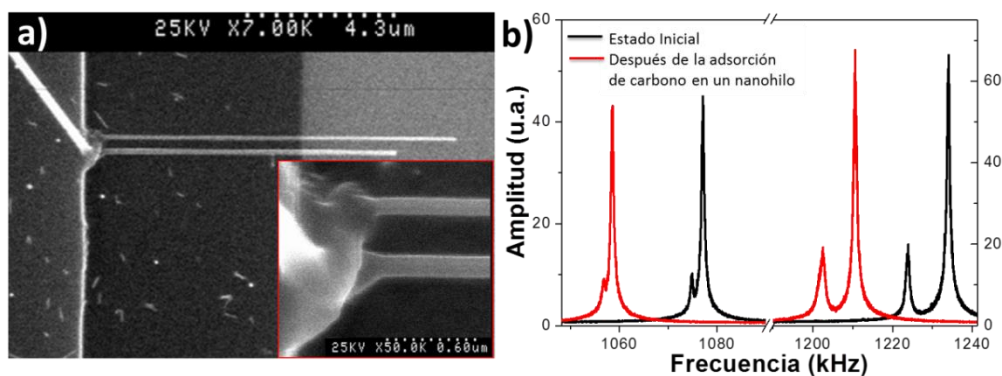


Figura 6.19. a) Imagen de microscopio electrónico de dos nanohilos de silicio unidos en sus bases. b) Espectro de amplitud del nanohilo largo antes y después de la adsorción de carbono en su extremo libre.

6.7.3. Amplificación Paramétrica

En este último capítulo hemos visto como el uso del acoplamiento optomecánico permite mejorar de forma notable las prestaciones de los sensores nanomecánicos. Para solventar el bajo tiempo de respuesta de nuestra cavidad y producir fuerzas de retroalimentación en desfase con el movimiento, hemos utilizado procesos fototérmicos. De todos modos, existe también la posibilidad de producir la amplificación del movimiento con fuerzas en fase. Para ello, estas fuerzas deberán de modificar la constante elástica al doble de la frecuencia de resonancia del oscilador. Este efecto se denomina, amplificación paramétrica[39]. Al ser debida a fuerzas que actúan al doble de la frecuencia de resonancia, la ganancia será proporcional al cuadrado de la amplitud de movimiento y por tanto estas fuerzas deberán de modificar la constante elástica de manera muy significativa. Para ello se necesitará tener nanohilos muy largos y delgados, para que tengan una constante elástica muy baja, y aprovechar de forma eficiente el confinamiento de la luz. De esta manera la fuerza óptica generada por presión de radiación también podría utilizarse para producir la amplificación del movimiento y podríamos prescindir de las fuerzas fototérmicas, que como hemos visto producen mucha inestabilidad en la frecuencia de resonancia.

REFERENCIAS

1. Kippenberg, T.J., Vahala, K.J. "*Cavity optomechanics: Back-action at the mesoscale*" Science, **321**, 5893 (2008).
2. Kippenberg, T.J., Vahala, K.J. "*Cavity opto-mechanics*" Optics Express, **15**, 25 (2007).
3. Favero, I., Karrai, K. "*Optomechanics of deformable optical cavities*" Nature Photonics, **3**, 4 (2009).
4. Mohanty, P. "*Quantum Nanomechanics*" Applications of Nonlinear Dynamics-Model and Design of Complex Systems.
5. Gaidarzhy, A., Zolfagharkhani, G., Badzey, R.L., Mohanty, P. "*Evidence for quantized displacement in macroscopic nanomechanical oscillators*" Physical Review Letters, **94**, 3 (2005).
6. Wilson-Rae, I., Nooshi, N., Zwerger, W., Kippenberg, T.J. "*Theory of ground state cooling of a mechanical oscillator using dynamical backaction*" Physical Review Letters, **99**, 9 (2007).
7. Verhagen, E., Deleglise, S., Weis, S., Schliesser, A., Kippenberg, T.J. "*Quantum-coherent coupling of a mechanical oscillator to an optical cavity mode*" Nature, **482**, 7383 (2012).
8. Ramos, D., Gil-Santos, E., Pini, V., Llorens, J.M., Fernandez-Regulez, M., San Paulo, A., Calleja, M., Tamayo, J. "*Optomechanics with Silicon Nanowires by Harnessing Confined Electromagnetic Modes*" Nano Letters, **12**, 2 (2012).
9. Li, M., Pernice, W.H.P., Tang, H.X. "*Broadband all-photonic transduction of nanocantilevers*" Nature Nanotechnology, **4**, 6 (2009).
10. Eichenfield, M., Camacho, R., Chan, J., Vahala, K.J., Painter, O. "*A picogram- and nanometre-scale photonic-crystal optomechanical cavity*" Nature, **459**, 7246 (2009).
11. Vogel, M., Mooser, C., Karrai, K., Warburton, R.J. "*Optically tunable mechanics of microlevers*" Applied Physics Letters, **83**, 7 (2003).
12. Schliesser, A., Riviere, R., Anetsberger, G., Arcizet, O., Kippenberg, T.J. "*Resolved-sideband cooling of a micromechanical oscillator*" Nature Physics, **4**, 5 (2008).
13. Kleckner, D., Bouwmeester, D. "*Sub-kelvin optical cooling of a micromechanical resonator*" Nature, **444**, 7115 (2006).
14. Metzger, C.H., Karrai, K. "*Cavity cooling of a microlever*" Nature, **432**, 7020 (2004).
15. Tamayo, J. "*Study of the noise of micromechanical oscillators under quality factor enhancement via driving force control*" Journal of Applied Physics, **97**, 4 (2005).
16. Restrepo, J., Gabelli, J., Ciuti, C., Favero, I. "*Classical and quantum theory of photothermal cavity cooling of a mechanical oscillator*" Comptes Rendus Physique, **12**, 9-10 (2011).
17. Karrai, K. "*Photonics - A cooling light breeze*" Nature, **444**, 7115 (2006).

18. Law, C.K. "*Interaction between a moving mirror and radiation pressure- a hamiltonian-formulation*" Physical Review A, **51**, 3 (1995).
19. Ilic, B., Krylov, S., Craighead, H.G. "*Theoretical and experimental investigation of optically driven nanoelectromechanical oscillators*" Journal of Applied Physics, **107**, 3 (2010).
20. Sampathkumar, A., Murray, T.W., Ekinici, K.L. "*Photothermal operation of high frequency nanoelectromechanical systems*" Applied Physics Letters, **88**, 22 (2006).
21. Ramos, D., Tamayo, J., Mertens, J., Calleja, M. "*Photothermal excitation of microcantilevers in liquids*" Journal of Applied Physics, **99**, 12 (2006).
22. Okamoto, H., Ito, D., Onomitsu, K., Sanada, H., Gotoh, H., Sogawa, T., Yamaguchi, H. "*Vibration Amplification, Damping, and Self-Oscillations in Micromechanical Resonators Induced by Optomechanical Coupling through Carrier Excitation*" Physical Review Letters, **106**, 3 (2011).
23. Chan, J., Mayer Alegre, T.P., Safavi-Naeini, A.H., Hill, J.T., Krause, A., Groeblacher, S., Aspelmeyer, M., Painter, O. "*Laser cooling of a nanomechanical oscillator into its quantum ground state*" Nature, **478**, 7367 (2011).
24. Teufel, J.D., Donner, T., Li, D., Harlow, J.W., Allman, M.S., Cicak, K., Sirois, A.J., Whittaker, J.D., Lehnert, K.W., Simmonds, R.W. "*Sideband cooling of micromechanical motion to the quantum ground state*" Nature, **475**, 7356 (2011).
25. Favero, I., Stapfner, S., Hunger, D., Paulitschke, P., Reichel, J., Lorenz, H., Weig, E.M., Karrai, K. "*Fluctuating nanomechanical system in a high finesse optical microcavity*" Optics Express, **17**, 15 (2009).
26. Anetsberger, G., Arcizet, O., Unterreithmeier, Q.P., Riviere, R., Schliesser, A., Weig, E.M., Kotthaus, J.P., Kippenberg, T.J. "*Near-field cavity optomechanics with nanomechanical oscillators*" Nature Physics, **5**, 12 (2009).
27. Grudinin, I.S., Lee, H., Painter, O., Vahala, K.J. "*Phonon Laser Action in a Tunable Two-Level System*" Physical Review Letters, **104**, 8 (2010).
28. Ding, L., Senellart, P., Lemaitre, A., Ducci, S., Leo, G., Favero, I. "*GaAs micro-nanodisks probed by a looped fiber taper for optomechanics applications*" Proceedings of SPIE, **7712**, (2010).
29. Ding, L., Baker, C., Senellart, P., Lemaitre, A., Ducci, S., Leo, G., Favero, I. "*Wavelength-sized GaAs optomechanical resonators with gigahertz frequency*" Applied Physics Letters, **98**, 11 (2011).
30. Deotare, P.B., McCutcheon, M.W., Frank, I.W., Khan, M., Loncar, M. "*Coupled photonic crystal nanobeam cavities*" Applied Physics Letters, **95**, 3 (2009).
31. Kouh, T., Karabacak, D., Kim, D.H., Ekinici, K.L. "*Diffraction effects in optical interferometric displacement detection in nanoelectromechanical systems*" Applied Physics Letters, **86**, 1 (2005).

32. Karabacak, D., Kouh, T., Ekinici, K.L. "*Analysis of optical interferometric displacement detection in nanoelectromechanical systems*" Journal of Applied Physics, **98**, 12 (2005).
33. Cao, L., White, J.S., Park, J.S., Schuller, J.A., Clemens, B.M., Brongersma, M.L. "*Engineering light absorption in semiconductor nanowire devices*" Nature Materials, **8**, 8 (2009).
34. Cao, L., Fan, P., Vasudev, A.P., White, J.S., Yu, Z., Cai, W., Schuller, J.A., Fan, S., Brongersma, M.L. "*Semiconductor nanowire optical antenna solar absorbers*" Nano Letters, **10**, 2 (2010).
35. Gil-Santos, E., Ramos, D., Martinez, J., Fernandez-Regulez, M., Garcia, R., San Paulo, A., Calleja, M., Tamayo, J. "*Nanomechanical mass sensing and stiffness spectrometry based on two-dimensional vibrations of resonant nanowires*" Nature Nanotechnology, **5**, 9 (2010).
36. Nichol, J.M., Hemesath, E.R., Lauhon, L.J., Budakian, R. "*Displacement detection of silicon nanowires by polarization-enhanced fiber-optic interferometry*" Applied Physics Letters, **93**, 19 (2008).
37. Tamayo, J., Calleja, M., Ramos, D., Mertens, J. "*Underlying mechanisms of the self-sustained oscillation of a nanomechanical stochastic resonator in a liquid*" Physical Review B, **76**, 18 (2007).
38. Sheard, B.S., Gray, M.B., Mow-Lowry, C.M., McClelland, D.E., Whitcomb, S.E. "*Observation and characterization of an optical spring*" Physical Review A, **69**, 5 (2004).
39. Zalalutdinov, M., Olkhovets, A., Zehnder, A., Ilic, B., Czaplewski, D., Craighead, H.G., Parpia, J.M. "*Optically pumped parametric amplification for micromechanical oscillators*" Applied Physics Letters, **78**, 20 (2001).
40. Pini, V., Tamayo, J., Gil-Santos, E., Ramos, D., Kosaka, P., Tong, H.D., van Rijn, C., Calleja, M. "*Shedding Light on Axial Stress Effect on Resonance Frequencies of Nanocantilevers*" ACS nano).
41. Ramos, D., Mertens, J., Calleja, M., Tamayo, J. "*Study of the origin of bending induced by bimetallic effect on microcantilever*" Sensors, **7**, 9 (2007).
42. Meninger, S., Mur-Miranda, J.O., Amirtharajah, R., Chandrakasan, A.P., Lang, J.H. "*Vibration-to-electric energy conversion*" Ieee Transactions on Very Large Scale Integration (Vlsi) Systems, **9**, 1 (2001).
43. Naik, A.K., Hanay, M.S., Hiebert, W.K., Feng, X.L., Roukes, M.L. "*Towards single-molecule nanomechanical mass spectrometry*" Nature Nanotechnology, **4**, 7 (2009).

Apéndice

Dependencia de la constante de acoplamiento mecánico con las dimensiones y propiedades de los resonadores

El cálculo de la constante de acoplamiento mecánico es un problema sumamente complejo que no tiene solución analítica. Debido a la dificultad de este problema, trataremos de entender cuáles son los factores que intervienen en el acoplamiento mecánico a partir de simulaciones por elementos finitos. Tras haber dado los primeros pasos durante el capítulo 3, en este apéndice extenderemos nuestro estudio y trataremos de dar con una expresión que nos ayude a predecir el acoplamiento y por tanto a diseñar nuestros dispositivos con el acoplamiento deseado para cada aplicación.

En principio, el acoplamiento mecánico dependerá de las dimensiones de las palancas y la membrana, así como de sus propiedades mecánicas del dispositivo $\kappa = \kappa(E, \rho, \nu, L, W, L_O, p, h)$. En el capítulo 3, vimos que el acoplamiento depende exponencialmente de la distancia entre los resonadores, $\kappa = \kappa_0 e^{-p/\lambda}$ y por tanto, podemos expresarlo como

$$\kappa = \kappa_0(E, \rho, \nu, L, W, L_O, h) e^{-p/\lambda(E, \rho, \nu, L, W, L_O, h)} \quad (\text{A.1})$$

La figura 3.8 muestra la constante de acoplamiento en función de esa distancia para distintas longitudes de membrana y como se ajusta perfectamente a exponenciales decrecientes. Analicemos con más detalle ambos términos de la exponencial. Si representamos los coeficientes κ_0 , constante de acoplamiento mecánico inicial, y λ , coeficiente de absorción, en función de la longitud de la membrana, figura A.1, vemos que para longitudes de membrana menores que $L/4$, κ_0 sigue una dependencia cuadrática con la longitud de la membrana, mientras que λ se comporta de forma lineal. El decaimiento exponencial de la constante de acoplamiento en función de la separación de las palancas se atribuye con la absorción de una onda mecanoacústica en un sólido. Por tanto, es lógico pensar que cuanto más larga sea la membrana, mayor será la absorción y por tanto el coeficiente de absorción, λ . Que la constante de acoplamiento inicial, κ_0 , dependa de la longitud de la membrana al cuadrado puede tener que ver con la forma de los modos de vibración, ya que el primer modo de vibración puede aproximarse como una función cuadrática cerca del extremo fijo, y en última instancia con la relación entre la transferencia de energía de un resonador a través de la membrana y su energía total. Este razonamiento nos hace sospechar que κ_0 no depende solamente de la longitud de la membrana, sino que dependerá de la relación entre la longitud de la membrana con respecto a la longitud total de la palanca y la membrana. Para confirmar este hecho, se han realizado múltiples simulaciones variando también la longitud de las palancas. También se comprobó que λ no depende de esta, como es lógico, ya que el coeficiente de absorción no debe de depender de la longitud del oscilador porque este no absorbe la energía transmitida a lo largo de la membrana. Sustituyendo estas dependencias en la ecuación A.1 tenemos

$$\kappa = \left(\frac{L_0}{L+L_0} \right)^2 f_1(E, \rho, \nu, W, h) e^{-\lambda L_0 / g_1(E, \rho, \nu, W, h)} \quad (\text{A.2})$$

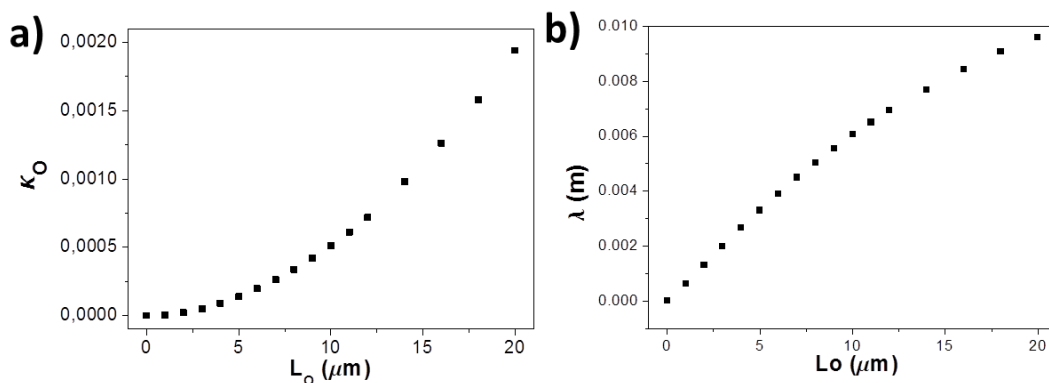


Figura A.1. (a) Constante de acoplamiento inicial y (b) coeficiente de absorción, en función de la longitud de la membrana.

Con respecto a las propiedades del material, destacar que la constante de acoplamiento no depende ni del módulo de Young, ni de la densidad del dispositivo, siempre que las palancas y la membrana sean del mismo material (Figura A.2). Esto también parece lógico ya que ambas frecuencias dependerán en igual medida de estas propiedades y por tanto, la constante de acoplamiento, que depende de la diferencia relativa de ambas frecuencias, no depende de ellas. Por otro lado, sí que depende del módulo de Poisson, siendo κ_0 y λ proporcionales a $(1 - \nu)$, figura A.3. Nuevamente, sustituyendo en la ecuación A.2

$$\kappa = \left(\frac{L_0}{L+L_0} \right)^2 (1 - \nu) f_2(W, h) e^{-p/[L_0*(1-\nu)g_2(W,h)]} \quad (A.3)$$

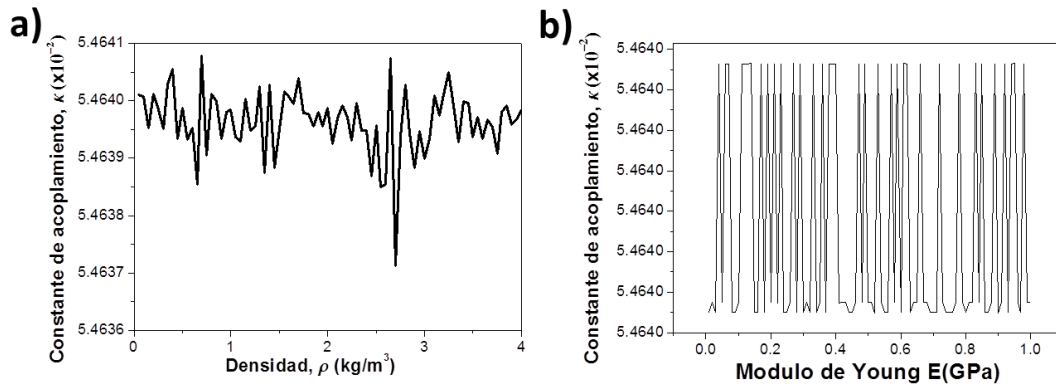


Figura A.2. Constante de acoplamiento en función de: (a) el módulo de Young. (b) Constante de acoplamiento inicial y (f) coeficiente de absorción, en función del coeficiente de Poisson.

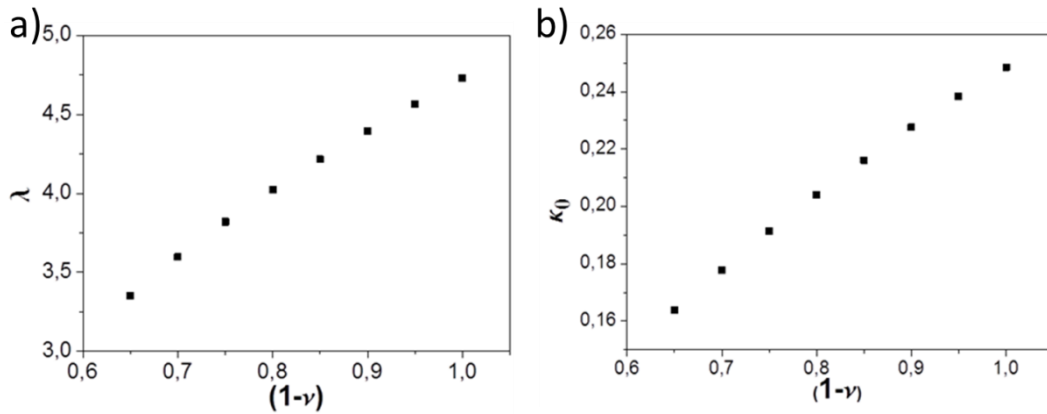


Figura A.3. a) Constante de acoplamiento inicial y b) coeficiente de absorción, en función del coeficiente de Poisson.

Si nos fijamos ahora en el espesor del dispositivo, la constante de acoplamiento si que depende de este, ya que no es constante, pero de una manera muy suave. Variando el espesor en más de un orden de magnitud, la constante de acoplamiento solo se ve afectada en un 10% por lo que lo podemos considerarla independiente (Figura A.4.a). La mayor dificultad llega cuando queremos analizar la dependencia de la constante de acoplamiento con la anchura de la membrana. Al igual que para las longitudes, el decaimiento exponencial realmente no dependerá de la separación entre palancas y de la anchura de estas por separado, sino que están relacionados.

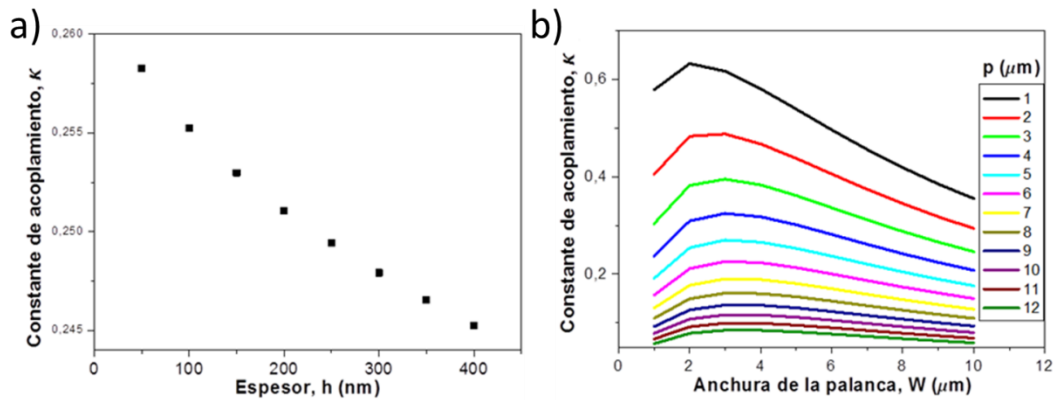


Figura A.4. Constante de acoplamiento en función de: (a) Espesor del dispositivo (b) anchura de la palanca para distinta separación entre palancas.

La figura A.4.b muestra la dependencia de la constante de acoplamiento mecánico para distintas separaciones entre palancas en función de la anchura de estas. El comportamiento de κ en función este parámetro es muy complejo como cabría de esperar, ya que es precisamente la anchura de las palancas la que le confiere al problema el grado de bidimensional y lo que hace que sea tan complejo. Finalmente llegamos a una expresión para la constante de acoplamiento mecánico que nos permitirá, una vez fijado el ancho de la palanca, estimar su valor para distintas longitudes tanto de la membrana, como de las palancas y de su separación

$$\kappa = \left(\frac{L_0}{L + L_0} \right)^2 (1 - \nu) f_3(W) e^{-p/[g_3(p,W) \cdot L_0 \cdot (1-\nu)]} \quad (\text{A.4})$$

Lista de Publicaciones

1. **E. Gil-Santos**, D. Ramos, J. Martinez, M. Fernandez-Regulez, R. Garcia, A. San Paulo, M. Calleja and J. Tamayo. “*Nanomechanical mass sensing and stiffness spectrometry based on two-dimensional vibrations of resonant nanowires*”. Nature Nanotechnology, 5, 9 (641-645) 2010.
2. **E. Gil-Santos**, D. Ramos, V. Pini, J. M. Llorens, M. Fernández-Regúlez, A. San Paulo, M. Calleja and J. Tamayo. “*Optomechanics with silicon nanowires by harnessing confined electromagnetic modes*”. Nanoletters, 12, 2, (932-937) 2012.
3. **E. Gil-Santos**, D. Ramos, A. Jana, M. Calleja, A. Raman and J. Tamayo. “*Mass sensing based on deterministic and stochastic responses of elastically coupled nanocantilevers*”. Nanoletters, 9, 12, (4122-4127) 2009.
4. **E. Gil-Santos**, D. Ramos, V. Pini, M. Calleja and J. Tamayo. “*Exponentially tuning of the coupling constant of coupled microcantilevers by modifying their separation*”. Appl. Phys. Lett. 98, 12 (123108) 2011.
5. V. Pini, J. Tamayo, **E. Gil-Santos**, D. Ramos, P. Kosaka, H.D. Tong, C. van Rijn and M. Calleja. “*Shedding light on axial stress effect on resonance frequencies of nanocantilevers*”. ACS Nano, 5, 6 (4269-4275) 2011.
6. D. Ramos, M. Arroyo-Hernandez, **E. Gil-Santos**, H. Duy Tong, C. van Rijn, M. Calleja and J. Tamayo. “*Arrays of dual nanomechanical resonators for selective biological detection*”. Analytical Chemistry, 81, 6 (2274-2279) 2009.
7. P. Kosaka, J. Tamayo, **E. Gil-Santos**, J. Mertens, V. Pini, N. F. Martinez, O. Ahumada and M. Calleja. “*Simultaneous imaging of the topography and dynamic properties of nanomechanical systems by optical beam deflection microscopy*”. Journal of Applied Physics, 109, 6 (064315) 2011.